

P12-2009-84

Х. Т. Холмуродов^{1, 2, *}, Н. А. Шастова², М. С. Абашева²,
В. В. Тузова², А. С. Чулкова², О. Н. Медведкина²

МОЛЕКУЛЯРНО-ДИНАМИЧЕСКОЕ МОДЕЛИРОВАНИЕ
ФАЗОВЫХ ПРЕВРАЩЕНИЙ К–Na ДИСИЛИКАТНОГО
СТЕКЛА В РАСТВОРЕ АКТИВНОЙ СРЕДЫ

Направлено в журнал «Физика и химия стекла»

¹Объединенный институт ядерных исследований, Дубна

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

*E-mail: mirzo@jinr.ru

Холмуродов Х. Т. и др.

P12-2009-84

Молекулярно-динамическое моделирование фазовых превращений К–Na дисиликатного стекла в растворе активной среды

Целью настоящей работы является изучение процессов структурных превращений К–Na дисиликатного стекла, взаимодействующего с раствором активной среды. Анализ структурных перестроек К–Na дисиликатного стекла в растворе щелочи NaOH проводится на базе метода молекулярной динамики (МД). Построена целостная картина динамических процессов в системе К–Na дисиликатное стекло — активная среда. Вычислены диффузионные коэффициенты и структурные функции радиального распределения (ФРП) атомов.

Работа выполнена в Лаборатории радиационной биологии ОИЯИ.

Препринт Объединенного института ядерных исследований. Дубна, 2009

Kholmurodov Kh. T. et al.

P12-2009-84

Molecular Dynamics Simulations of Phase Transitions of K–Na Disilicate Glass in an Active Solvent Medium

The aim of the present work is to study the structural change processes for metal disilicate glasses, interacting with an active media solution. The analysis of K–Na disilicate glass structural behavior in the alkali solution NaOH has been performed on a basis of molecular dynamics (MD) simulation method. A complete picture of the dynamical processes in the system of K–Na disilicate glass – active solution has been constructed. The atoms diffusion coefficients and structural radial distribution functions (RDF) are calculated.

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

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

ВВЕДЕНИЕ

Исследование структурных, динамических и вибрационных свойств калиево-натриевых силикатных стекол является одной из чрезвычайно интересных и важных областей как в научном, так и в прикладном аспекте — в химии и промышленности жидких стекол [1–3]. Химический состав жидких стекол характеризуют по содержанию кремнезема и других оксидов независимо от конкретной формы их существования в растворе. Жидкое стекло — щелочной раствор силикатов натрия $(\text{Na}_2\text{Si}_2\text{O}_3)_n$ и калия $(\text{K}_2\text{Si}_2\text{O}_3)_n$. Натриевые жидкие стекла обычно выпускают в пределах значений силикатного модуля от 2,0 до 3,5 при плотности растворов от 1,3 до 1,6 г/см³. Калиевые жидкие стекла характеризуются значениями силикатного модуля 2,8–4,0 при плотности 1,25–1,40 г/см³. Жидкое стекло принято характеризовать по виду щелочного катиона (натриевые, калиевые, литиевые, четвертичного аммония); по массовому или мольному соотношению в стекле SiO_2 и M_2O (где М — это К, Na, Li или четвертичный аммоний). Мольное соотношение $\text{SiO}_2/\text{M}_2\text{O}$ принято называть силикатным модулем жидкого стекла n ; по абсолютному содержанию — в жидком стекле SiO_2 и M_2O в массовых %; по содержанию примесных оксидов — Al_2O_3 , Fe_2O_3 , CaO , MgO , SO_3 ; по плотности растворов жидкого стекла (г/см³).

С научно-исследовательской точки зрения изучение структурных свойств дисиликатного жидкого стекла на базе т.н. функций радиального распределения (ФРР) вызывают неизменный интерес [4–6]. Дисиликатное стекло является тем физическим объектом, где конкурируют всевозможные нетривиальные состояния и переходы типа стекло — жидкость — твердое тело. На системах, подобных дисиликатному стеклу, исследуются чрезвычайно важные вопросы ближнего, среднего и дальнего упорядочивания атомов, скоррелированные с вопросами фазового превращения [4–8].

Целью настоящей работы является молекулярно-динамическое (МД) моделирование структурных поведений и фазовых превращений K^+-Na^+ дисиликатного стекла, взаимодействующего с раствором активной среды. Вычислены диффузионные коэффициенты и структурные функции радиального распределения (ФРР) частиц. Построена целостная картина динамических превращений в системе K^+-Na^+ дисиликатное стекло — активная среда.

МАТЕРИАЛЫ И МЕТОДЫ

Для МД-моделирования использован программный пакет DL_POLY, разработанный группой молекулярного моделирования в Лаборатории Даресбери, Англия, при поддержке Исследовательского совета инженерных и физических наук для моделирования конденсированных фаз (проект ССР5) [9]. Код DL_POLY представляет собой программный пакет многоцелевого назначения для МД-расчетов; его авторами являются У. Смит, Т. Р. Форестор и И. Т. Тодоров [10]. Мы использовали версию 2.19 кода DL_POLY, а начальная геометрия комплекса молекул K–Na дисиликатного стекла задана согласно конфигурациям из базы данных пакета (http://www.cse.scitech.ac.uk/ccg/software/DL_POLY/).

Начальная конфигурация молекулярной системы K–Na дисиликатное стекло + раствор приведена на рис. 1. 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.

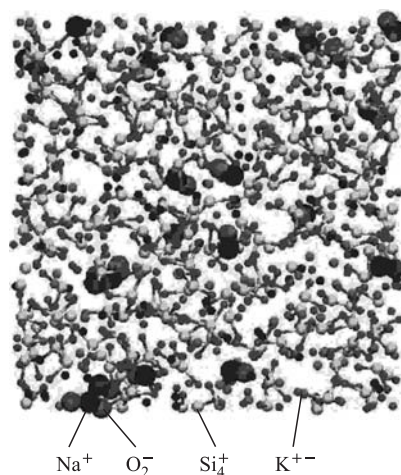


Рис. 1. Начальная конфигурация молекул K⁺-Na⁺ дисиликатного стекла в растворе щелочи NaOH

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:

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

Активный раствор состоит из комплекса частиц NaOH, представленных в виде двухатомных молекул (рис. 2) с равного значения и противоположного по знаку зарядом каждого сайта $q^* = qe$, где e — единица заряда (заряд протона). В табл. 1 приведены значения массы и заряда частиц, используемые 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.

Таблица 1. Значения массы и заряда частиц в системе дисиликатное стекло — раствор

Атом	Массовое число (в ед. m_e , а. е. м.)	Зарядовое число q^* (в ед. e , заряд протона)
Na ⁺	22,9898	1,0
K ⁺	39,1000	1,0
Si ⁴⁺	28,0860	4,0
O ²⁻	15,9994	-2,0
Na	22,9898	+ [0,0; 0,01; 0,02; ... , 1,0]
OH	17,0073	- [0,0; 0,01; 0,02; ... , 1,0]

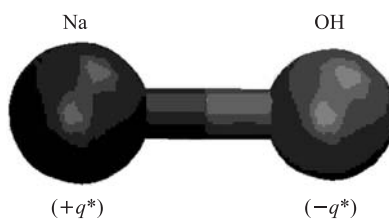


Рис. 2. Конфигурация молекулы раствора, окружающего молекулу дисиликатного стекла

В МД-моделировании был использован потенциал Бакингема (buck), описывающий силовое поле невалентных (вандерваальсовых (ВДВ)) взаимодействий молекулы K–Na дисиликатного стекла с активным раствором. Параметры взаимодействия и функциональные формы потенциалов приведены

в табл. 2. Начальная конфигурация молекулярной системы К–Na дисиликатного стекла с раствором щелочи NaOH релаксировалась при кубических граничных условиях по пространственным направлениям; объем ячейки был выбран $(24,179 \text{ \AA})^3$. Процесс МД-вычисления начинается после доведения системы до энергетически минимизированных состояний при заданной температуре.

Таблица 2. Функциональная форма и параметры потенциала для атомных пар

Атомная пара	Потенциал	Параметры	Функциональная форма	A , кДж/моль	ρ , \AA	C , \AA ⁶
K ⁺ –K ⁺ K ⁺ –Na ⁺ K ⁺ –Na Na ⁺ –Na ⁺ Na ⁺ –Na K ⁺ –ОН Na ⁺ –ОН Na–Na Si ⁴⁺ –K ⁺ Si ⁴⁺ –Na ⁺ Si ⁴⁺ –Na Si ⁴⁺ –Si ⁴⁺ Si ⁴⁺ –ОН	buck	$U(r) =$ $= A \exp\left(-\frac{r}{\rho}\right) -$ $\frac{C}{r^6}$	A, ρ, C	0	1	0
O ²⁻ –K ⁺	buck	...	A, ρ, C	8236593,92	0,37	0
O ²⁻ –Na ⁺	buck	...	A, ρ, C	5236217,19	0,36	0
O ²⁻ –Na	buck	...	A, ρ, C	5236217,19	0,36	0
O ²⁻ –ОН	buck	...	A, ρ, C	8236593,92	0,37	0

Компьютерное моделирование включало в себя два этапа. На первом этапе расчеты проводились в коротких шкалах времен (тысячи шагов по времени); в ансамбле NVE — с варьированием кулоновских полей (зарядовых чисел), создаваемых частицами раствора. На втором этапе было выполнено МД-моделирование на длительных, субнаносекундных, интервалах в ансамбле NVT. При этом температура системы составляла 1000 К; значение температуры контролировалось в течение всего процесса моделирования (сотни тысяч шагов по времени); параметр релаксации термостата был 0,01 пс. Шаг интегрирования ньютоновских уравнений движения — 1 фс. В МД-моделировании число молекул K⁺–Na⁺ было равно 240 (по 120 ионов K⁺ и Na⁺); ионов Si⁴⁺ — 240, O₂ — 600; раствора NaOH — 40 (по 20 ча-

стиц Na^+ и OH^-); соблюдаются условия электронейтральности системы. Топология силового поля К–Na дисиликатного стекла с раствором учитывает всевозможные взаимодействия и химические связи системы. Для вычисления кулоновских электростатических взаимодействий был применен алгоритм суммирования по Эвалду с параметром сходимости сумм 10^{-5} . Результаты МД-моделирования и трехмерные изображения молекулярной системы анализировали с помощью программных пакетов VMD [11] и MOLMOL [12].

РЕЗУЛЬТАТЫ И ОБСУЖДЕНИЕ

Динамика системы в короткой шкале времен (NVE-ансамбль)

Порог значения температуры и энергии системы. Относительно релаксированных структур молекул К–Na дисиликатного стекла с раствором NaOH были выполнены серии МД-вычислений при разных значениях зарядового числа $q = -q(\text{OH}^-) = +q(\text{Na}^+) = 0,0; 0,01; 0,02, \dots, 1,0$ в одинаковых условиях моделирования, описанных выше. Отметим, что значения зарядового числа q варьировались только для атомов раствора; для молекул К–Na дисиликатного стекла все заряды имеют фиксированные значения, как показано в табл. 1. Результаты вычисления динамических изменений температуры и энергии системы приведены на рис. 3, *a–г* и 4. Видно, что при всех значениях зарядового числа в интервале $0 < q < 0,04$ температура и энергия системы варьируются около одинаковых значений. При значениях зарядового числа $q = -q(\text{OH}^-) = +q(\text{Na}^+) > 0,04$ происходит существенное изменение динамики температурно-энергетических характеристик системы, свидетельствующее о фазовых перестройках в системе. А именно, при $q > 0,04$ мы наблюдаем три разные области в значениях температуры и энергии системы (ср. рис. 3, *a–г* с 4). При этом наблюдается существенный рост вращательных движений молекул раствора. Анализ температурно-энергетических характеристик с построенными динамическими анимационными картинками показывает корреляцию вращательных движений молекул раствора со структурными изменениями К–Na дисиликатного стекла.

Динамика структурных конформационных изменений. Для иллюстрации структурных изменений молекулы К–Na дисиликатного стекла и сравнения динамики системы при различных температурно-энергетических режимах, приведенных на рис. 3, *a–г*, ниже построены анимационные картины (snapshots) со значением зарядового числа $q = 0,07$. На рис. 5 представлены шесть последовательных конфигураций системы, иллюстрирующих динамические изменения в системе дисиликатное стекло — активный раствор. Анимационные картины (рис. 5) подтверждают сильную диффузионную способность молекул активной среды (NaOH) в системе К–Na дисиликатного

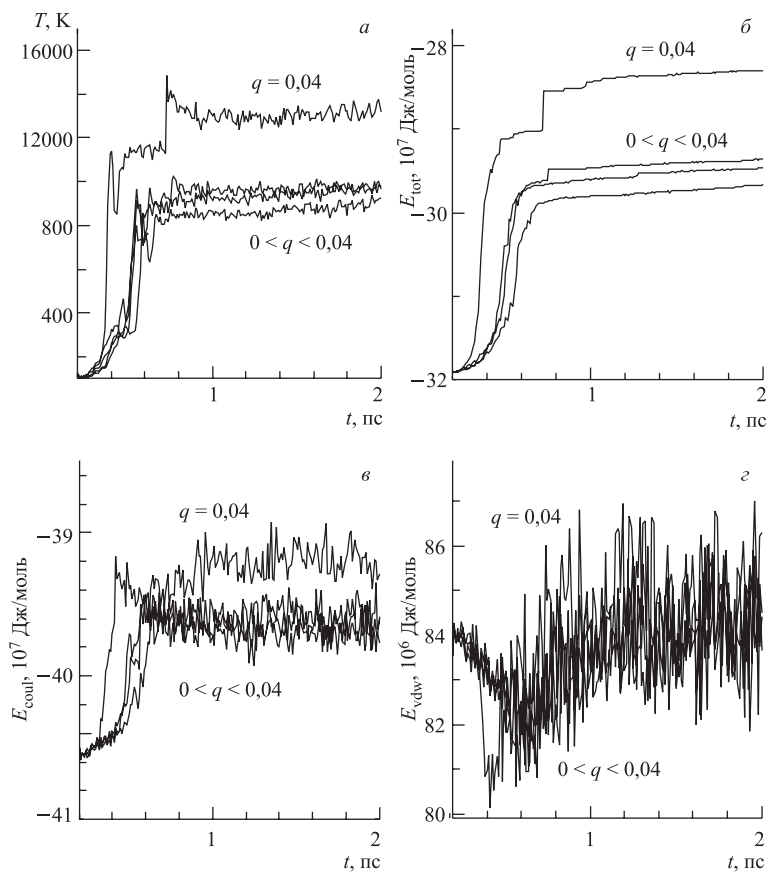


Рис. 3. Динамика температуры (а), полной энергии (б), энергии кулоновских (в), вандерваальсовых (г) взаимодействий системы для различных значений зарядового числа молекул раствора в ансамбле NVE

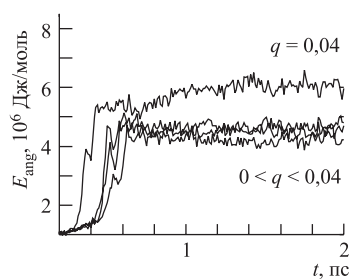


Рис. 4. Динамика энергии валентных угловых связей системы для различных значений зарядового числа молекул раствора в ансамбле NVE

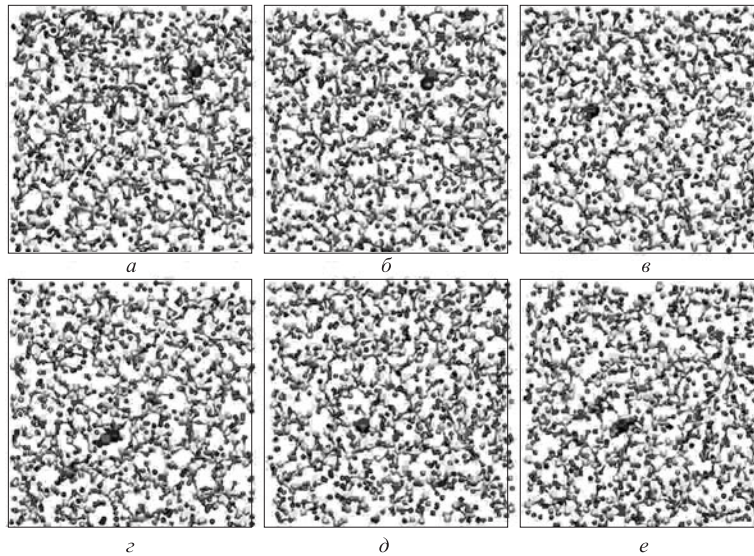


Рис. 5. Шесть последовательных конфигураций системы, иллюстрирующих динамические изменения в системе K^+-Na^+ дисиликатное стекло — активный раствор

стекала. Для наглядности на рис. 5 представлены положения одной молекулы раствора NaOH, показывающие вибрационную мобильность всех молекул раствора. Оценка зависимости коэффициентов диффузии от кулоновского потенциала (зарядового числа q) также показывает сильный рост значений для активной среды в отличие от зависимости коэффициентов диффузии для исходных атомов.

Динамика системы в субнаносекундном интервале (NVT-ансамбль)

Базируясь на результатах, представленных на рис. 3–5, дальнейшие расчеты мы выполняли на более длинных интервалах (сотни тысяч шагов по времени) с контролем температуры системы в NVT-ансамбле.

Температура и полная энергия системы при различных значениях кулоновских полей (зарядового числа). Прежде всего, построены графики зависимости температуры от времени (см. рис. 6) в ансамбле NVT при различных значениях кулоновских полей. Нетрудно заметить, что динамика температуры системы реализуется около равновесного значения 1000 К. Значение полной энергии (рис. 7) в зависимости от степени кулоновских эффектов (зарядового числа q), вносимых частицами раствора в структуру K–Na дисиликатного стекла, колеблется вокруг равновесных состояний системы.

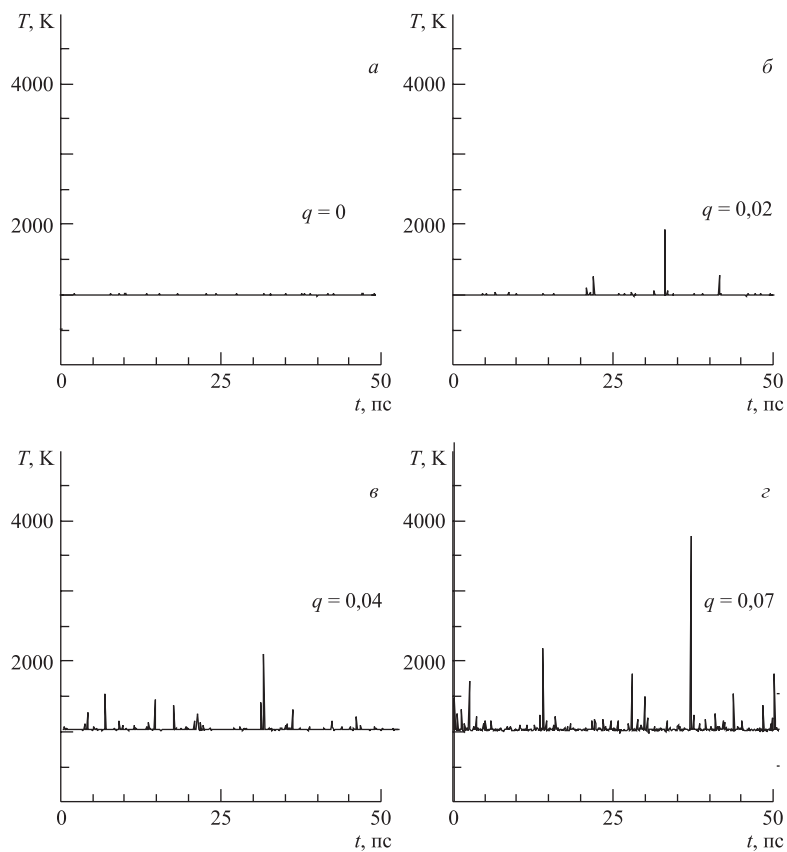


Рис. 6. Изменение температуры в зависимости от различных значений зарядового числа (NVT-ансамбль)

Энергия невалентных (кулоновских и ВДВ) взаимодействий. Результаты вычислений энергии невалентных взаимодействий в системе К–Na ди-силикатное стекло — активный раствор приведены в последующей серии графиков (рис. 8, *а–г* и 9, *а–г*). С ростом зарядового числа раствора от $q = 0$ до 1 происходит увеличение энергии кулоновских взаимодействий. В зависимости от степени кулоновских эффектов динамика изменений энергии ВДВ-взаимодействий с $q = 0$ до 0,02 иллюстрирует убывание, а при значениях $q > 0,02$ происходит ее заметное увеличение (ср. рис. 8, *б* и 9, *б*). Видно, что значение $q = 0,02$ является некой отправной точкой (фазовых изменений в системе), с которой заметно начинает меняться поведение кривых энергии ВДВ-взаимодействий.

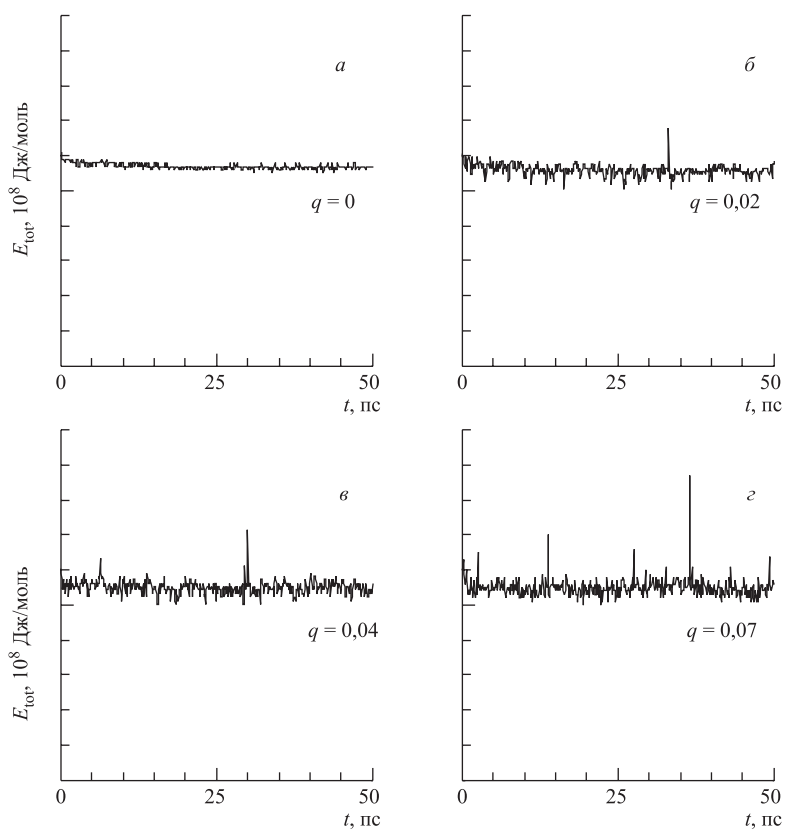


Рис. 7. Изменение полной энергии системы для различных значений зарядового числа молекул раствора (NVT-ансамбль)

Энергия валентных угловых связей. На рис. 10 представлены энергии валентных угловых взаимодействий при $q = 0; 0,02; 0,04$ и $0,07$ соответственно. Видно, что, начиная со значений $q = 0,02$, происходят существенные осцилляции энергии угловых (вращательных) связей. Важно отметить, что графики энергии валентных угловых связей отображают динамику вращательных (вибрационных) колебаний молекул раствора. Таким образом, увеличение степени кулоновских взаимодействий в системе К–Na дисиликатное стекло — активный раствор приводит к резким вращательным колебаниям, прежде всего, молекул раствора. В свою очередь, это приводит к изменению поведения и динамики всей системы в целом.

Значения коэффициентов диффузии при различных значениях потенциала. В табл. 3 представлены значения коэффициентов диффузии, вы-

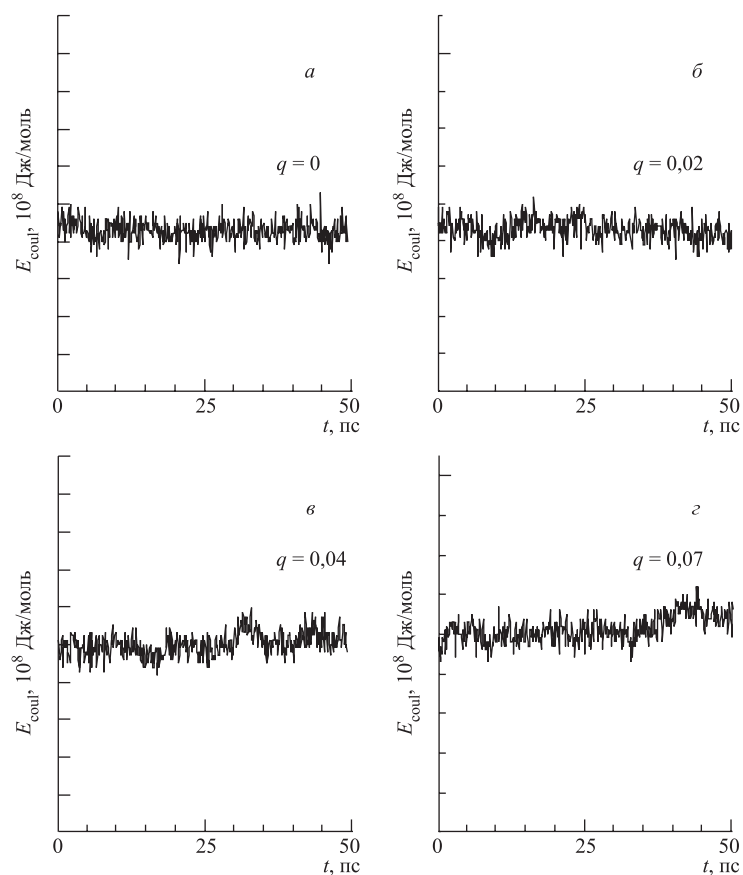


Рис. 8. График зависимости энергии кулоновских взаимодействий от времени с учетом значения зарядового числа (NVT-ансамбль)

Таблица 3. Значения коэффициентов диффузии при различных значениях потенциала

Atom	$D (q = 0), 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$	$D (q = 0,01), 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$	$D (q = 0,02), 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$	$D (q = 0,04), 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$	$D (q = 0,07), 10^{-9} \text{ м}^2/\text{с}$
Na ⁺	1,7706E-02	5,3831E-01	9,3890E-01	3,4701E+00	4,4328E+00
K ⁺	1,1869E-02	6,7339E-01	8,3489E-01	1,5971E+00	2,9476E+00
Na	0,0000E+00	7,0067E+00	6,1948E+00	3,2426E+01	5,3677E+01
OH	0,0000E+00	7,5892E+00	6,0643E+00	3,2298E+01	5,2659E+01
Si ⁴⁺	1,4173E-03	5,4538E-03	1,3388E-02	1,5359E-02	3,2696E-02
O ²⁻	2,9201E-03	1,1718E-02	1,9980E-02	3,4271E-02	4,3693E-02

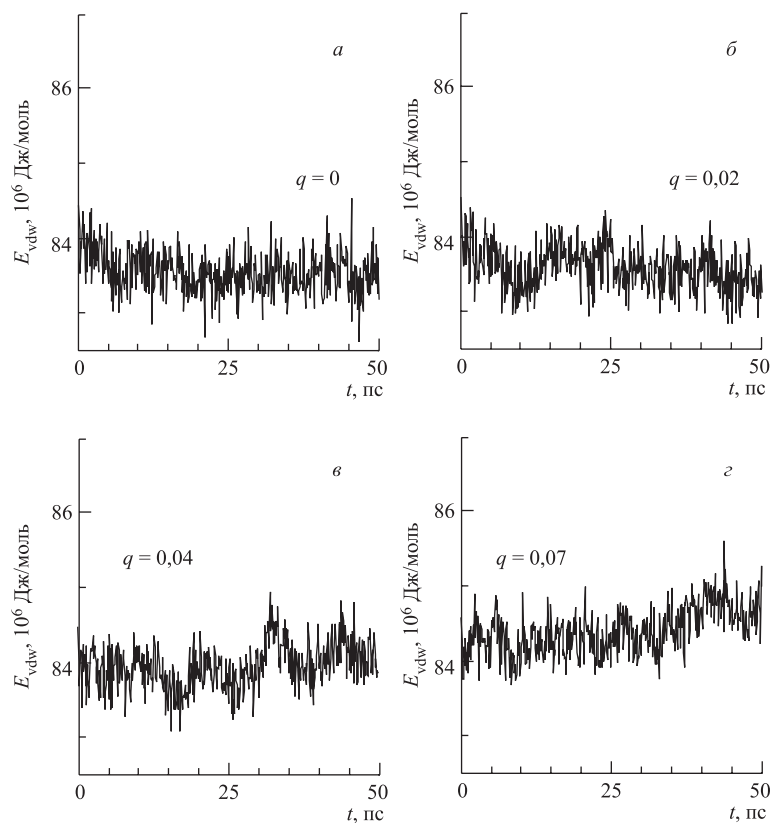


Рис. 9. График зависимости энергии вандерваальсовых взаимодействий от времени с учетом значения зарядового числа (NVT-ансамбль)

численных для различных атомов при соответствующих потенциалах, приведенных на графиках выше. Для всех атомов, входящих в систему К–На дисиликатного стекла, наблюдается увеличение коэффициента диффузии при увеличении значения кулоновского потенциала (зарядового числа q молекулы раствора). Однако для молекул активной среды (щелочного раствора NaOH) значения коэффициента диффузии имеют минимум при $q = 0,02$ с последующим возрастанием при увеличении q . Наглядно зависимость коэффициентов диффузии от значения q представлена на рис. 11.

Результаты рис. 11 хорошо коррелируют с данными по энергии угловых вращательных связей (рис. 10), а также с поведением энергии кулоновских и ВДВ-взаимодействий (рис. 8 и 9).

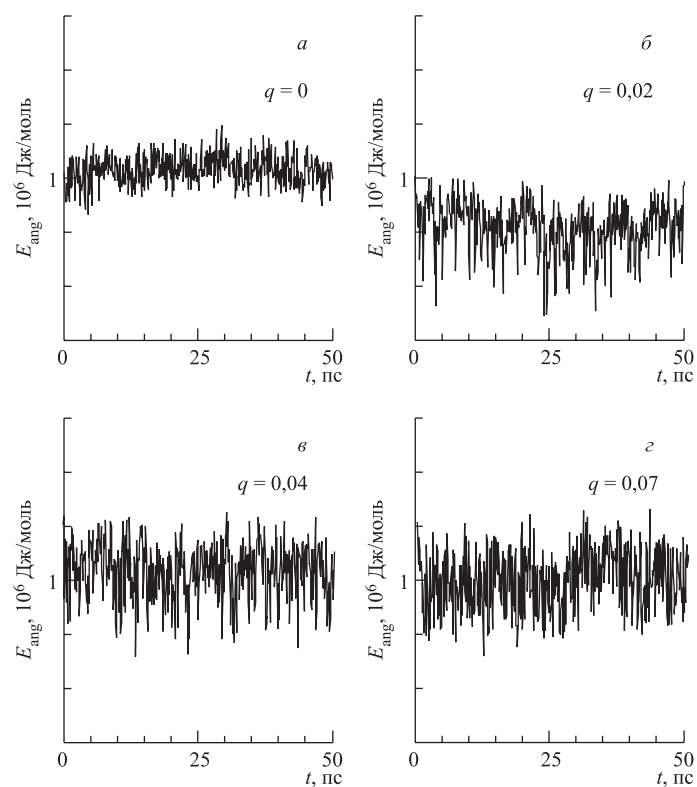


Рис. 10. График зависимости энергии угловых связей от времени (NVT-ансамбль)

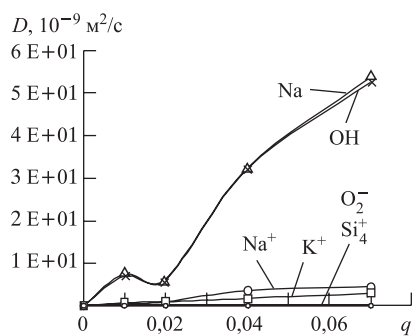


Рис. 11. График зависимости коэффициентов диффузии для атомов системы K^+-Na^+ дисиликатного стекла — раствор при различных значениях q

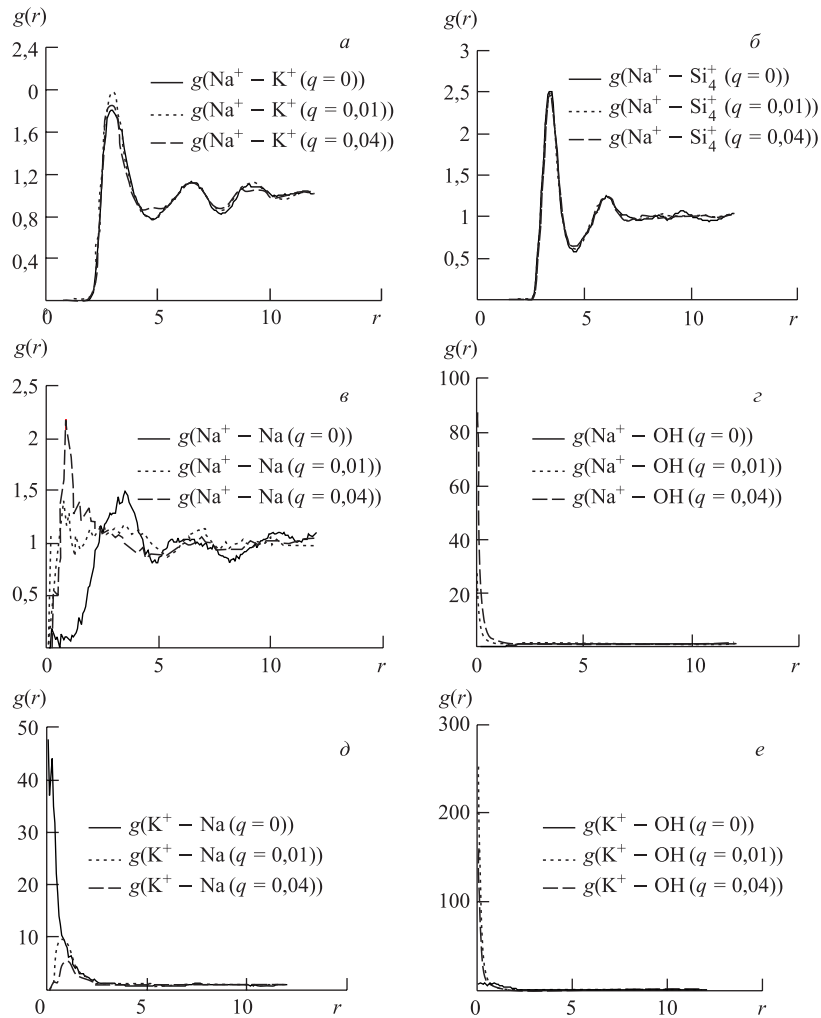


Рис. 12. Графики функции радиального распределения для шести различных связей (атомных пар) изучаемой системы

Функция радиального распределения. По результатам МД-моделирования построены графики функций радиального распределения (ФРР) для всех атомных пар в системе К–Na дисиликатное стекло — активный раствор NaOH (рис. 12, а–е). Следует отметить, что ФРР играет центральную роль в молекулярном моделировании — она измеряет, как атомы организуют себя около других атомов, и пропорциональна вероятности нахождения двух атомов, раз-

деленных расстоянием $r \pm Dr$. Поведение ФРР зависит от состояния вещества (плотности и температуры); для твердых тел график ФРР имеет вид ломаных кривых; для газов — вид одного широкого плато. ФРР для жидкостей имеет промежуточный вид между тем, что характерно для кристаллов, и тем, что для газов; для жидкости появляются второй и третий пики, и они выглядят более сглаженными.

На рис. 12, *a, б* представлены графики, показывающие поведение ФРР для самого К–Na дисиликатного стекла — атомных пар $\text{Na}^+ - \text{K}^+$ и $\text{Na}^+ - \text{Si}^{4+}$ в зависимости от значений зарядового числа $q = 0; 0,01; 0,04$ соответственно. По результатам рис. 12, *a, б* мы имеем поведение ФРР, свойственное структурной упорядоченности жидкости, жидкого стекла — наблюдаются второй и третий пики. При этом увеличение q приводит слегка к сглаживанию вторых и третьих пиков. Рис. 12 показывает поведение ФРР для атомных пар К–Na дисиликатного стекла — активный раствор: *в)* $\text{Na}^+ - \text{Na}$, *з)* $\text{Na}^+ - \text{OH}$, *д)* $\text{K}^+ - \text{Na}$ и *е)* $\text{K}^+ - \text{OH}$. Мы наблюдаем, что для ионов натрия и калия ФРР имеет противоположное поведение при их взаимодействии с одним и тем же атомом раствора. Как видно из рис. 12, *в, з*, увеличение кулоновских эффектов (заряда q раствора) приводит к существенному усилению ФРР; иными словами, сила химического взаимодействия между ионом натрия в $\text{K}^+ - \text{Na}^+$ дисиликатном стекле с ионом натрия в растворе увеличивается. В то же время поведение ФРР на рис. 12, *д, е* указывает, что взаимодействие между ионом калия в $\text{K}^+ - \text{Na}^+$ дисиликатном стекле с ионом натрия относительно ничтожно; ионы K^+ предпочитают эффективно обмениваться с группой OH раствора.

Поведение кривых ФРР и коэффициентов диффузии $\text{K}^+ - \text{Na}^+$ дисиликатного стекла — активный раствор хорошо согласуется с данными температурно-энергетических изменений. Увеличение вклада кулоновских полей (эффекта зарядового числа раствора q) приводит к фазовому переходу в системе, выражающемуся в существенном изменении динамики энергий невалентных и валентных связей, диффузионных коэффициентов и ФРР. При этом, что касается поведения ФРР, отчетливо наблюдаются различия зависимостей, которые указывают, какие именно атомы $\text{K}^+ - \text{Na}^+$ дисиликатного стекла вступают в наиболее эффективный обмен с атомами активного раствора.

ЛИТЕРАТУРА

1. Качалов Н. Стекло. М.: Изд-во АН СССР. 1959.
2. Шульц М. М., Мазурин О. В. Современные представления о строении стекол и их свойствах. Л.: Наука, 1988; М.: Академкнига, 2007.
3. Varshneya A. K. Fundamentals of Inorganic Glasses. Society of Glass Technology, Sheffield, 2006. P. 682.

4. *Стюд Дж. В., Этвуд Дж. Л.* Супрамолекулярная химия. В 2-х т. М.: Академкнига, 2007.
5. *Ожован М. И.* Топологические характеристики связей в окисных системах SiO₂ и GeO₂ при переходе стекло–жидкость // ЖЭТФ. 2006. Т. 130, №5. С. 944–956.
6. *Greaves G.N.* Defects and Disorder in Crystalline and Amorphous Solids, ed. C. R. A. Catlow, Kluwer, Dordrecht, 1994. P. 87.
7. *Smith W., Forester T.R., Greaves G.N., Haytera S., Gillanb M.J.* Molecular Dynamics Simulation of Alkali-Metal Diffusion in Alkali-Metal Disilicate Glasses // J. Mater. Chem., 1997. V. 7 (2). P. 331–336.
8. *Florian P., Vermillion K.E., Grandinetti P.J., Farnan I., Stebbins J.F.* Cation Distribution in Mixed Alkali Disilicate Glasses // J. Am. Chem. Soc., 1996. V. 118. (14). P. 3493–3497.
9. *Smith W., Forester T.* // J. Molec. Graphics, 1996. V. 14, № 136. P. 3.
10. *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.
11. *Humphrey W., Dalke A., Schulten K.* VMD — Visual Molecular Dynamics // J. Molec. Graphics. 1996. V. 14, № 1. P. 33–38.
12. *Koradi R., Billeter M., Wuthrich K.* MOLMOL: a Program for Display and Analysis of Macromolecular Structures // J. Molec. Graphics, 1996. V. 14. P. 51–55.

Получено 3 июня 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. 1,33. Тираж 205 экз. Заказ № 56688.

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

E-mail: publish@jinr.ru

www.jinr.ru/publish/