

ФИЗИКА КОНДЕНСИРОВАННОГО СОСТОЯНИЯ ВЕЩЕСТВА

Исследование эволюции структуры сетки водородных связей водных кластеров при температурах 1 и 300 К

А. В. Хахалин^{1,2,a}, А. В. Королёва¹, В. Т. Шалабаева¹, Я. Н. Ширшов^{1,b}

¹Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, физический факультет, кафедра молекулярной физики. Россия, 119991, Москва, Ленинские горы, д. 1, стр. 2.

²Институт нанотехнологий микроэлектроники РАН. Россия, 119991, Москва, Ленинский просп., д. 32А.

E-mail: ^aavkhakhalin@mail.ru, ^bynts@bk.ru

Статья поступила 04.03.2012, подписана в печать 27.04.2012.

Методом Монте-Карло проведено моделирование водных кластеров $(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ и $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ ($n \leq 8$) при температурах 1 и 300 К. Выявлены все разновидности образуемых типов структур сеток водородных связей равновесных конфигураций данных кластеров, а также наиболее вероятные типы таких структур при температурах 1 и 300 К. Проведенный анализ наиболее вероятных типов структур сетки водородных связей равновесных конфигураций водных кластеров выявил их наследование в кластерах с n молекулами воды у кластеров с $n - 1$ молекулой воды с точностью до одной водородной связи.

Ключевые слова: кластеры воды, численное моделирование, метод Монте-Карло.

УДК: 539.2. PACS: 61.20.Ja.

Введение

В настоящее время структура водных кластеров в газовой фазе экспериментально и теоретически исследована достаточно хорошо, чтобы понять, какие типы кластеров при различных физических условиях могут встречаться. Однако экспериментальные данные по этим типам носят информацию только о количестве молекул воды в них содержащихся [1]. Из нее сложно понять детальную структуру кластеров. Теоретические расчеты основаны на предположении, что водные кластеры обладают минимальной потенциальной энергией [2]. Однако при нормальных условиях, несмотря на то что такие кластеры могут существовать дольше остальных, они появляются реже водных кластеров с более высокими значениями потенциальной энергии. Поэтому интерпретация структуры экспериментально регистрируемых водных кластеров в газовой фазе до сих пор представляется открытым вопросом.

1. Экспериментальная часть

В настоящей работе для изучения структуры сетки из водородных связей между молекулами воды под воздействием температуры (1 или 300 К) и примесей (катионы Na^+ или K^+) были выбраны следующие три водных кластера: $(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ и $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, где $2 \leq n \leq 8$. Молекулы H_2O описывались в рамках жесткой модели воды [3]. Для расчетов межмолекулярных взаимодействий молекул воды друг с другом и с катионом Na^+ или K^+ использовались атом-атомные потенциальные функции Полтева-Маленкова [4, 5]. В расчетах использовался жестко детерминированный начальными условиями генератор случайных чисел двойной точности «gap2» [6]. Моделирование процесса гидратации осуществлялось посредством генерирования равновесных при температуре 1 или 300 К конфигураций из молекул воды, взаимодействующих

друг с другом и с гидратируемым катионом Na^+ или K^+ . Их получали методом Монте-Карло с процедурой Метрополиса [7] при периодических граничных условиях (расчетная ячейка представляла собой куб с длиной стороны 40 Å). Температура учитывалась в Больцмановском факторе $\exp(-\frac{\Delta E}{kT})$, где ΔE — изменение потенциальной энергии системы, k — постоянная Больцмана, T — температура системы. Также учет температуры происходил при определении амплитудного смещения Δ каждой молекулы воды и величины изменения одного из трех углов ее вращения с помощью следующего выражения: $\Delta = (2 \cdot \text{Random} - 1) \cdot A\sqrt{T}$, где Random — случайное число, принадлежащее интервалу $[0, 1]$, A — масштабный эмпирический коэффициент, равный 0.05, подобранный с учетом малости смещения и поворота молекулы воды на каждом шаге по сравнению с ее размерами и ориентацией по отношению к соседним молекулам H_2O , T — численное значение температуры системы в кельвинах. Вращение осуществлялось относительно случайно выбираемой одной из трех осей координат X, Y, Z , проходящих через центр атома кислорода. При $T = 300$ К максимально возможная амплитуда смещения составляла 0.86 Å, а наибольшее изменение величины одного из трех углов не превышало 50°.

Из последовательно получаемых равновесных при температуре 1 или 300 К конфигураций каждого кластера с шагом 1000 формировалась их 10 000 выборка. Из 20 таких выборок образовывался исследуемый набор. На основании анализа в этом наборе значений количеств равновесных конфигураций, соответствующих оригинальным типам структур сеток из водородных связей, определялись их средние весовые коэффициенты и ошибки их определения с уровнем значимости 5%. Тип структуры с наибольшим весовым коэффициентом, встречающимся во всех 20 выборках в наборе, назывался наиболее вероятным типом.

Для поиска H-связей в расчетах использовался следующий геометрический критерий [8]: между атомами кислорода (O) или O и атомом водорода (H) H-связь существует, если расстояние между ними не более 3.2 Å, а расстояние H...O не более 2.4 Å. Этот критерий с высокой точностью позволяет выявлять H-связи с участием молекул воды в твердых веществах и с достаточной (ошибки не более 5%, по оценкам «хвостов» распределений из работ [9]) при моделировании жидкой воды.

Под структурной характеристикой сетки из водородных связей подразумевается набор водородо-связанных геометрических фигур, каждая из которых является связанным ориентированным (ребро направлено от кислорода, являющегося донором протона к кислороду-акцептору) графом, вершинами которого являются атомы кислорода, а ребрами — водородные связи между молекулами воды. Анализ структур сетки водородных связей равновесных конфигураций водного кластера с катионом осуществлялся по формализованным признакам, основанным на теории графов [10]. Признаки, по которым производилось сравнение сеток водородных связей, следующие: 1) количество молекул воды, входящих в первую координационную сферу (ПКС) катиона; 2) количество водородо-связанных фигур из молекул воды (сюда же входят не связанные водородными связями «одиночные» молекулы воды); 3) набор количеств молекул воды в каждой водородо-связанной фигуре (набор количеств вершин графов); 4) набор количеств водородных связей в каждой водородо-связанной фигуре (набор количеств ребер графов); 5) наборы количеств образованных каждой молекулой воды в водородо-связанной фигуре водородных связей (наборы степеней вершин графов). Данная методика не позволяет учесть только хиральность водородо-связанных фигур из молекул воды.

2. Результаты

С помощью описанной выше методики анализа структуры сеток водородных связей происходило выявление различий в равновесных конфигурациях кластеров.

В результате численного моделирования в каждом из трех исследованных кластеров выявлены все разновидности образуемых типов структур сеток водородных связей, а также наиболее вероятные при температуре 1 и 300 К типы таких структур. Зависимости количества образуемых типов структур сеток водородных связей в кластерах $(\text{H}_2\text{O})_n$, $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ и $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ от n при температурах 1 и 300 К показаны на рис. 1.

На рис. 2–4 представлены полученные конфигурации водных кластеров при 1 К с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей.

На рис. 5–7 представлены полученные конфигурации водных кластеров при 300 К с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей.

3. Обсуждение результатов

Представленные зависимости на рис. 1 имеют степенной вид. Из них следует, что разнообразие структуры сетки водородных связей между молекулами воды

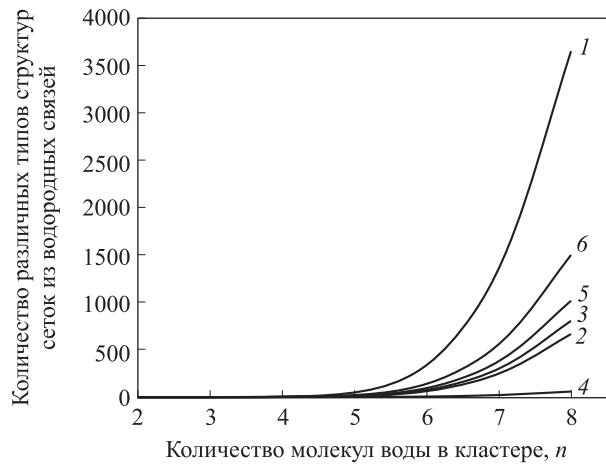


Рис. 1. Зависимость количества различных типов структур сеток водородных связей в водных кластерах от количества молекул воды в кластере. Кривая 1 — кластер $(\text{H}_2\text{O})_n$ при $T = 1$ К; 2 — $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при 1 К; 3 — $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при 1 К; 4 — $(\text{H}_2\text{O})_n$ при 300 К; 5 — $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при 300 К; 6 — $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при 300 К

сильно зависит от наличия между ними примесной частицы. Так, например, для кластера $(\text{H}_2\text{O})_8$ количество различных типов структур сеток водородных связей при изменении температуры с 1 до 300 К уменьшилось почти в 3 раза, тогда как для кластеров $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_8$ и $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_8$ оно увеличилось приблизительно в 2 раза. Уменьшение разновидности типов структур сеток водородных связей в равновесном при температуре 1 и 300 К кластере $(\text{H}_2\text{O})_n$ определяется эффектом испарения молекул воды в расчетной ячейке. При температуре 300 К кластер находится в газообразном состоянии (среднее расстояние от молекул воды в кластере $(\text{H}_2\text{O})_8$ при температуре 300 К до центра расчетной ячейки составляло 10.74 ± 0.35 Å, а при температуре 1 К это расстояние составляло 3.18 ± 0.01 Å).

При температуре 1 К в кластере $(\text{H}_2\text{O})_n$ при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 образуют связь друг с другом через атом кислорода молекулы 1 и атом водорода молекулы 2 (рис. 2). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается присоединением к предыдущему кластеру ($n = 2$) молекулы воды, с образованием связи с помощью атомов кислорода и водорода молекулы 3, атома кислорода молекулы 1 и атома водорода молекулы 2. Конфигурация кластера при $n = 4$ образуется аналогично предыдущей конфигурации, молекула 4 образует водородные связи с молекулами 1 и 3. Конфигурация кластера при $n = 5$ формируется за счет присоединения новой молекулы воды 5 к молекуле 2, причем пятая молекула располагается уже не в одной плоскости со всеми остальными молекулами. Конфигурация кластера при $n = 6$ получается посредством образования шестой молекулой связей с молекулами 5 и 3. В кластере при $n = 7$ образование новой конфигурации происходит за счет связывания молекул 5 и 6 с молекулой 7. При образовании кластера при $n = 8$ водородная связь между молекулами 5 и 7 разрывается. Молекула 8 присоединяется к молекуле 7 с помощью своего атома кислорода и атома водорода молекулы 7. Кроме того,

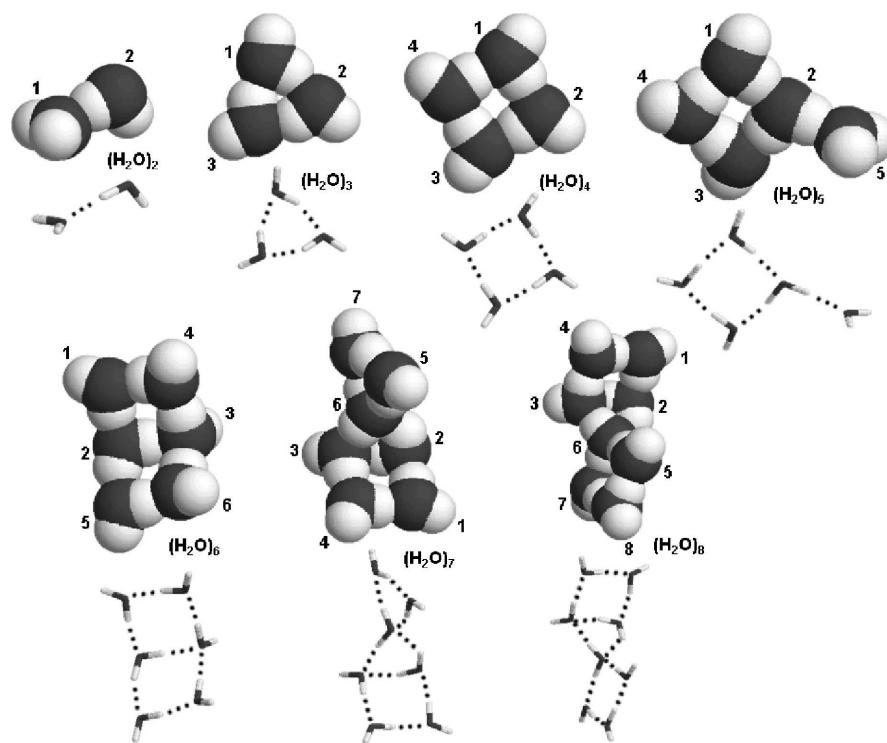


Рис. 2. Равновесные при температуре 1 К конфигурации кластера $(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

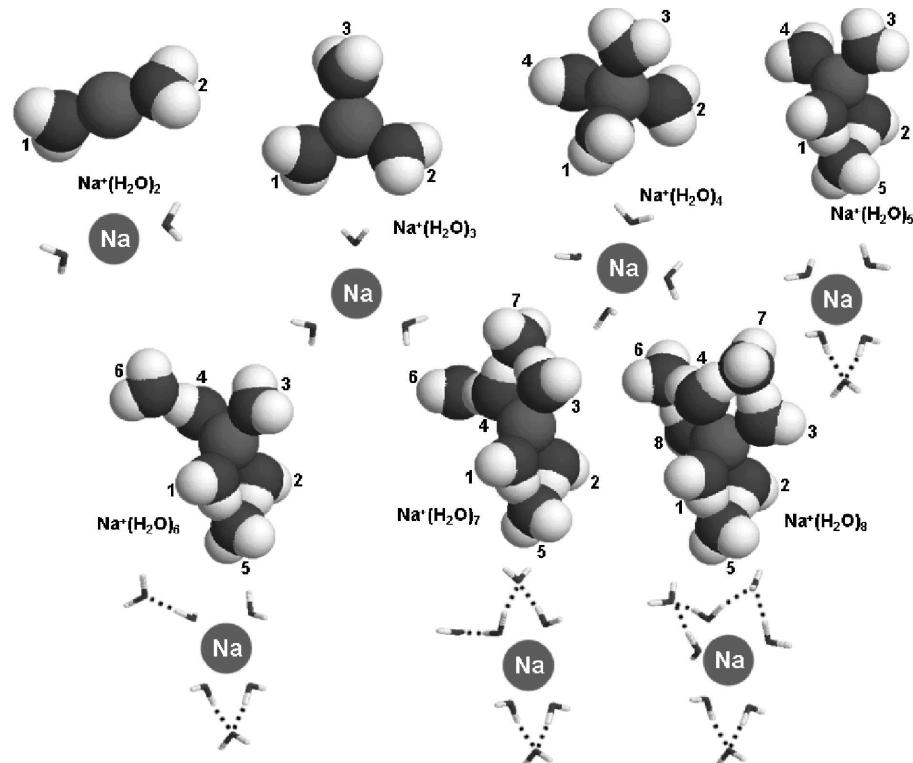


Рис. 3. Равновесные при температуре 1 К конфигурации кластера $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

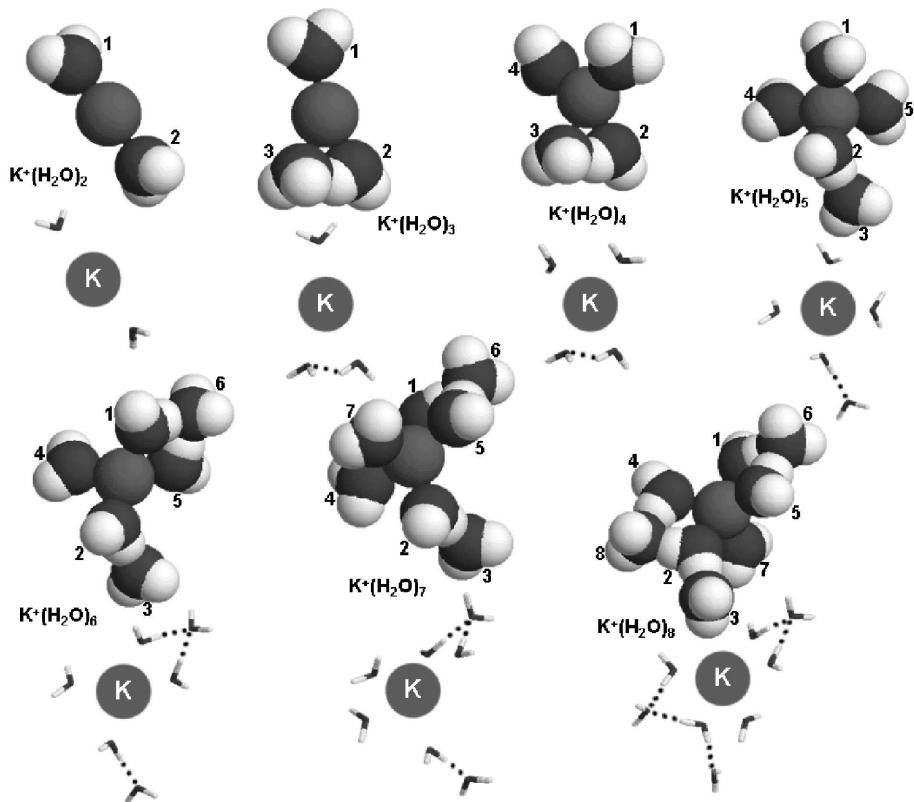


Рис. 4. Равновесные при температуре 1 К конфигурации кластера $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

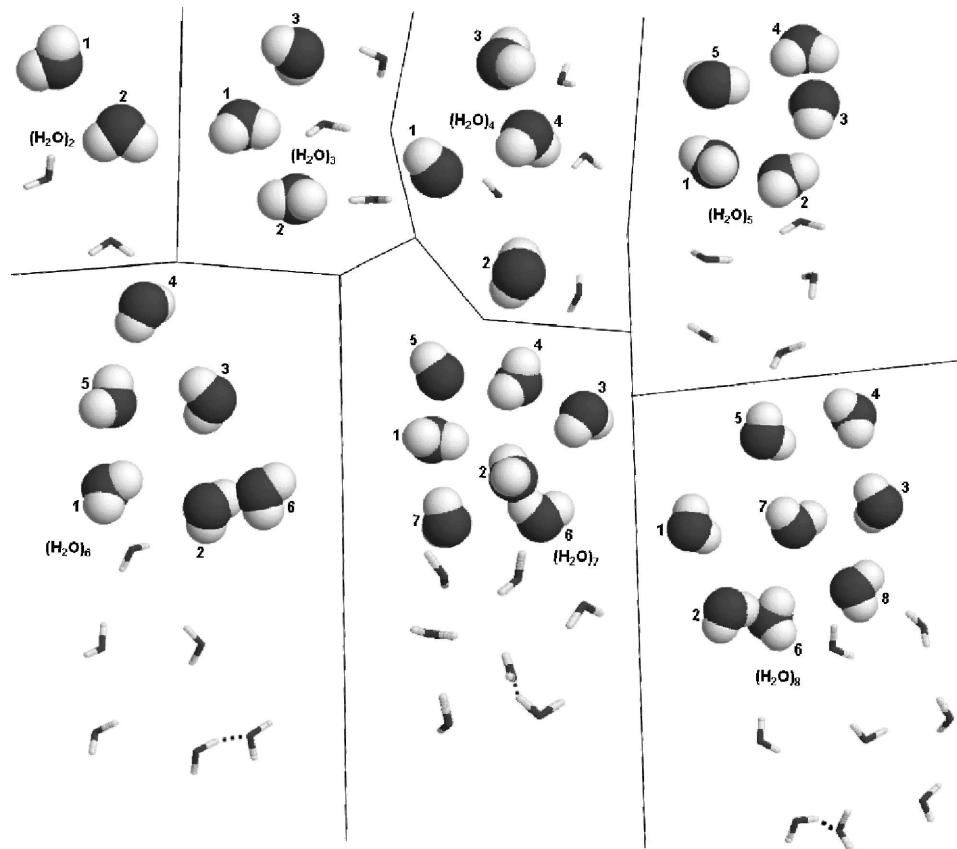


Рис. 5. Равновесные при температуре 300 К конфигурации кластера $(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

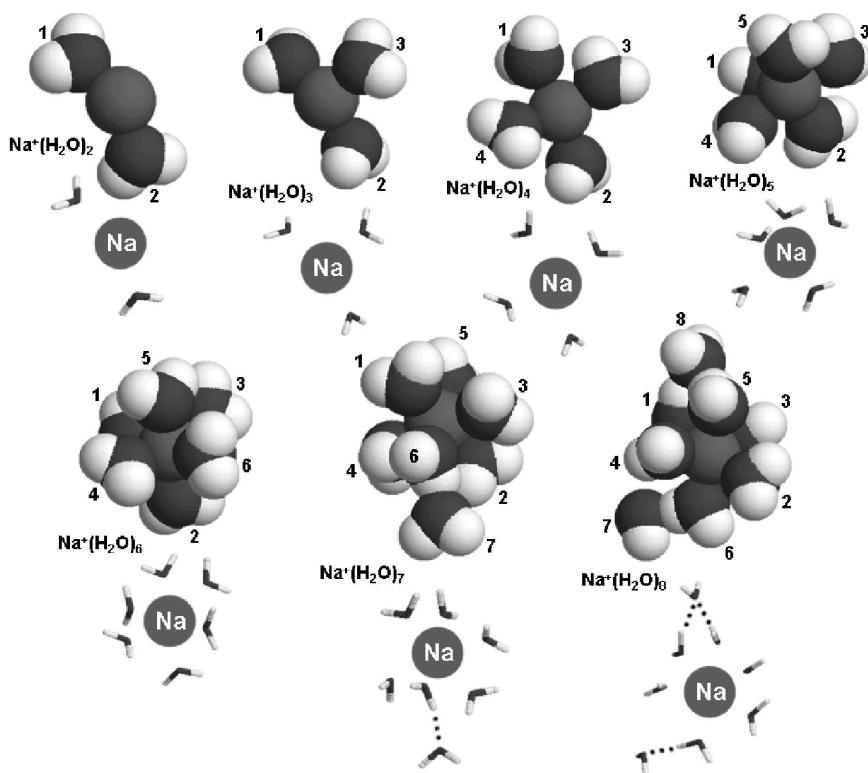


Рис. 6. Равновесные при температуре 300 К конфигурации кластера $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

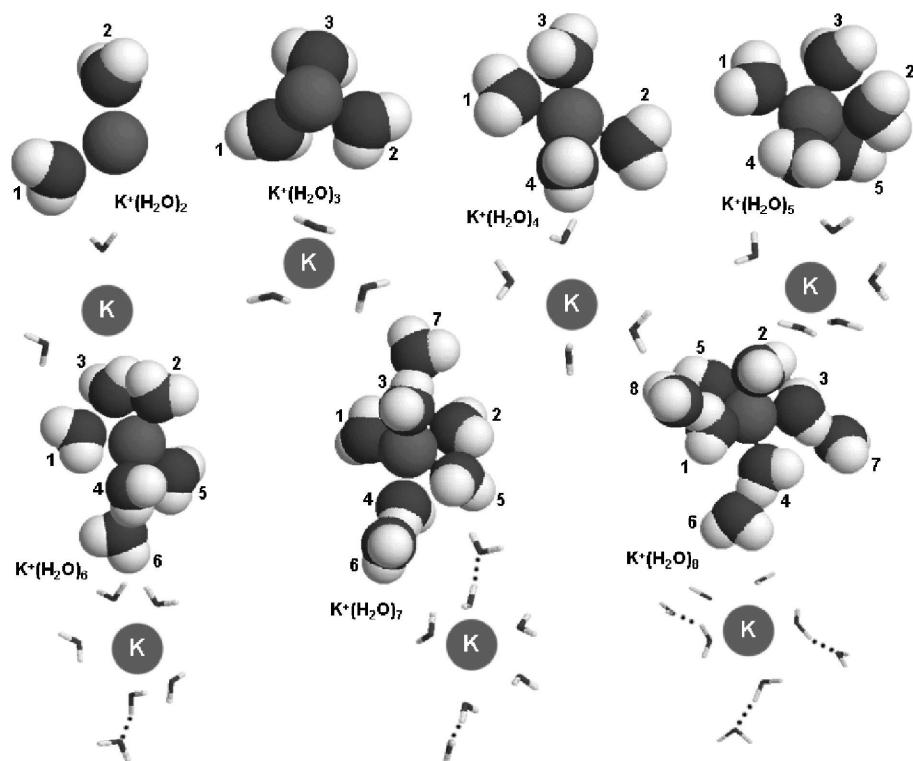


Рис. 7. Равновесные при температуре 300 К конфигурации кластера $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятному типу структуры сетки из водородных связей

молекула 8 присоединяется к молекуле 5 с помощью своего атома водорода и атома кислорода молекулы 5.

В кластере $(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 1 К отклонение от закономерности в наследовании наиболее вероятного типа сетки водородных связей наблюдается только при $n = 7$.

При температуре 1 К в кластере $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 располагаются в первой координационной сфере иона Na^+ без образования между ними водородных связей (рис. 3). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается добавлением в первую координационную сферу молекулы воды 3 также без образования ею водородных связей с соседними молекулами H_2O (1 и 2). Конфигурация кластера при $n = 4$ образуется аналогично предыдущему случаю (при $n = 3$) путем добавления молекулы воды 4. Конфигурация кластера при $n = 5$ аналогична предыдущему случаю (при $n = 4$) за тем исключением, что новая, 5-я молекула воды добавляется во вторую координационную сферу иона Na^+ и соединяется с двумя молекулами H_2O (1 и 2) из его первой координационной сферы водородными связями через их атомы водорода. Конфигурация кластера при $n = 6$ образуется аналогично предыдущей конфигурации за тем исключением, что 6-я молекула воды прикрепляется к молекуле 4 в первой координационной сфере иона, не задействованной в водородных связях. Причем атомы водорода шестой молекулы H_2O в водородной связи не задействованы. Конфигурация кластера при $n = 7$ образуется аналогично предыдущей конфигурации за тем исключением, что 7-я молекула H_2O связывает две молекулы 3 и 4 в первой координационной сфере иона, причем молекула 3 до этого момента не участвовала в водородной связи, а молекула 4 ее образовывала с молекулой 6. Конфигурация кластера при $n = 8$ формируется через добавление новой молекулы воды 8 в первую координационную сферу иона Na^+ и организацию через ее один атом водорода связи с атомом кислорода молекулы 6 из второй координационной сферы.

В кластере $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 1 К при формировании наиболее вероятного типа структуры сеток из водородных связей для конфигурации n наблюдается ее наследование с конфигурацией $n - 1$.

При температуре 1 К в кластере $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 располагаются в первой координационной сфере иона K^+ без образования между ними водородных связей (рис. 4). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается добавлением в первую координационную сферу молекулы воды 3, но уже с образованием водородной связи с молекулой 2. Конфигурация кластера при $n = 4$ формируется аналогично предыдущему случаю ($n = 3$) путем добавления молекулы воды 4 без образования ею водородной связи. При образовании кластера $n = 5$ молекула воды 3 переходит во вторую координационную сферу иона калия без разрыва связи с молекулой 2. Новая, 5-я молекула добавляется в первую координационную сферу без образования водородных связей с соседними молекулами воды. Конфигурация кластера при $n = 6$ получается за счет добавления молекулы 6 во вторую координационную сферу иона K^+ и ее соединения с двумя молекулами H_2O (1 и 5) из первой координационной

сферы. Причем атомы водорода 6-й молекулы воды в водородной связи не задействованы. Формирование конфигурации кластера при $n = 7$ происходит путем добавления молекулы 7 в первую координационную сферу иона калия без создания седьмой молекулой водородных связей. Конфигурация кластера при $n = 8$ образуется за счет связывания молекулой 8 двух молекул воды (2 и 4) в первой координационной сфере иона.

В кластере $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 1 К при формировании наиболее вероятного типа структуры сеток из водородных связей наблюдается отклонение от выявленной закономерности в ее наследовании только при $n = 5$.

Из рис. 2–4 видно, что при температуре 1 К наиболее вероятный тип структуры сетки из водородных связей между n молекулами воды каждого из трех кластеров образуется на основе наиболее вероятного типа при $n - 1$ (с точностью до одной водородной связи).

При температуре 300 К в кластере $(\text{H}_2\text{O})_n$ при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 не образуют друг с другом водородных связей (рис. 5). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается добавлением к предыдущему кластеру ($n = 2$) молекулы воды 3 без образования связи с соседними молекулами воды (1 и 2). Конфигурации кластеров при $n = 4$ и $n = 5$ формируются аналогично предыдущей конфигурации ($n = 3$) без образования водородных связей между молекулами. Конфигурация кластера при $n = 6$ получается путем добавления молекулы 6 и образования ею водородной связи с молекулой 2. Формирование конфигурации кластера при $n = 7$ происходит за счет добавления молекулы 7 без присоединения ее к остальным молекулам воды и с сохранением водородной связи между двумя молекулами воды в кластере. Конфигурация кластера при $n = 8$ образуется аналогично предыдущему случаю ($n = 7$) путем добавления молекулы воды 8.

В кластере $(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 300 К при формировании наиболее вероятного типа структуры сеток из водородных связей для конфигурации n наблюдается ее наследование с конфигурацией $n - 1$.

В кластере $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 300 К при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 располагаются в первой координационной сфере иона Na^+ без образования между ними водородных связей (рис. 6). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается добавлением в первую координационную сферу иона молекулы воды 3 также без образования ею водородных связей с соседними молекулами H_2O (1 и 2). Конфигурация кластера при $n = 4, 5, 6$ аналогична случаю при $n = 3$ и происходит путем добавления молекул воды 4, 5 и 6 в первую координационную сферу иона без образования водородных связей с соседними молекулами воды. Конфигурация кластера при $n = 7$ аналогична предыдущим случаям за тем исключением, что новая молекула воды добавляется во вторую координационную сферу иона Na^+ и соединяется через свой кислород с молекулой воды 6 из его первой координационной сферы водородной связью. Конфигурация кластера при $n = 8$ образуется аналогично предыдущей конфигурации за тем исключением, что восьмая молекула воды связывает ранее не

участвующие в водородных связях две молекулы воды (1 и 5), находящиеся в ПКС иона.

В кластере $\text{Na}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 300 К при формировании наиболее вероятного типа структуры сеток из водородных связей для конфигурации n наблюдается ее наследование с конфигурации $n - 1$.

В кластере $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 300 К при $n = 2$ молекулы воды 1 и 2 располагаются в первой координационной сфере иона K^+ без образования между ними водородных связей (рис. 7). Конфигурация кластера при $n = 3$ получается добавлением в первую координационную сферу иона молекулы воды 3 также без образования ею водородных связей с соседними молекулами H_2O (1 и 2). Конфигурация кластера при $n = 4, 5$ аналогична случаю при $n = 3$ и происходит путем добавления молекул воды 4 и 5 в первую координационную сферу иона без образования водородных связей с соседними молекулами воды. Конфигурация кластера при $n = 6$ аналогична предыдущим случаям за тем исключением, что новая молекула воды добавляется во вторую координационную сферу иона K^+ и соединяется с молекулой воды 4 из его первой координационной сферы водородной связью. Конфигурация кластера при $n = 7, 8$ образуется аналогично предыдущей конфигурации (при $n = 6$) путем присоединения седьмой и восьмой молекул воды к молекулам воды 3 и 1 соответственно. В образовании водородных связей между молекулами воды 4 и 6, 3 и 7, 1 и 8 не участвует ни один из атомов водорода молекул из второй координационной сферы (6, 7, 8). При формировании конфигурации n каждого кластера наблюдается ее наследование с конфигурации $n - 1$.

В кластере $\text{K}^+(\text{H}_2\text{O})_n$ при температуре 300 К при формировании наиболее вероятного типа структуры сеток из водородных связей для конфигурации n наблюдается ее наследование с конфигурации $n - 1$.

Из рис. 5–7 видно, что при температуре 300 К наследование в образовании наиболее вероятного типа структур сетки из водородных связей для каждого из трех кластеров сохраняется. Однако только равновесные конфигурации кластера $(\text{H}_2\text{O})_n$, соответствующие наиболее вероятным типам структур при температуре 300 К, состояли из разбросанных по всему объему расчетной ячейки одиночных молекул H_2O и водородо-связанных групп (состоящих из двух молекул воды).

Во всех конфигурациях водных кластеров с примесной частицей Na^+ или K^+ , соответствующих наиболее вероятным типам структур сеток из водородных связей, молекулы воды сосредоточены вблизи примесной частицы (в сфере радиусом не более 2 ПКС).

Заключение

На основании полученных результатов можно утверждать, что среди всего многообразия образуемых молекулами воды равновесных при температурах 1 и 300 К конфигураций существуют конфигурации с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей. Эти типы структур зависят от следующих факторов: 1) количество молекул воды их образующих (наиболее вероятный тип структуры сетки водородных связей для кластера с n молекулами воды является развитием наиболее вероятного типа структуры, сформированного кластером с $n - 1$ молекулой воды); 2) температура (с увеличением температуры количество водородных связей в наиболее вероятных типах структур уменьшается за счет эффекта испарения молекул воды); 3) присутствие примесей и их разновидность (наличие примесных частиц позволяет уменьшить эффект испарения молекул воды в равновесных конфигурациях с наиболее вероятными типами структур сеток из водородных связей, а разновидность примесной частицы влияет на разнообразие наиболее вероятных типов структур сеток из водородных связей в водных кластерах).

Список литературы

1. Moro R., Rabinovitch R., Xia C., Kresin V.V. // Phys. Rev. Lett. 2006. **97**, N 12. P. 123401.
2. Maheshwary S., Patel N., Sathyamurthy N. et al. // J. Phys. Chem. A. 2001. **105**, N 46. P. 10525.
3. Бушуев Ю.Г. Структурные особенности двух моделей воды и гидратных оболочек частиц (Не, Аг, Хе) по данным метода Монте-Карло: Дисс. ... канд. хим. наук. Иваново, 1990.
4. textitPoltev V.I., Grokhina T.A., Malenkov G.G. // J. Biomolec. Struct. Dynam. 1984. **2**, N 2. P. 413.
5. Теплухин А.В., Маленков Г.Г., Полтев В.И. // Изв. РАН. Сер. хим. 1998. **11**. С. 2166.
6. Vetterling W.T., Flannery B.P., Teukolsky S.A. Numerical Recipes in C: The Art of Scientific Computing. Cambridge, 1992. P. 281.
7. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N. et al. // J. Chem. Phys. 1953. **21**. P. 1087.
8. Маленков Г.Г. // Вода в дисперсных системах / Под ред. Б. В. Дерягина и др. М., 1989. С. 132.
9. Маленков Г.Г., Теплухин А.В., Полтев В.И. // Журн. структ. химии. 1989. **30**, № 4. С. 89.
10. Хахалин А.В., Теплухин А.В. // Биомедицинские технологии и радиоэлектроника. 2006. № 1–2. С. 70.

Investigation of the evolution of hydrogen bond structures in water clusters at temperatures 1 and 300 K

A. V. Khakhalin^{1,2,a}, A. V. Koroleva¹, V. T. Shalabaeva¹, Y. N. Shirshov^{1,b}

¹Department of Molecular Physics, Faculty of Physics, M. V. Lomonosov Moscow State University, Moscow 119991, Russia.

²Institute of Nanotechnologies of Microelectronics, Russian Academy of Sciences, Moscow 119991, Russia.

E-mail: ^aavkhakhalin@mail.ru, ^byns@bk.ru.

Computer simulation of $(H_2O)_n$, $Na^+(H_2O)_n$ and $K^+(H_2O)_n$ ($n \leq 8$) water clusters at temperatures of 1 and 300 K was carried out by method Monte Carlo. All the types of the hydrogen bond network structures at equilibrium configurations of water clusters and, among them, the most probable ones were detected. The analysis of the most probable types of hydrogen bond networks at the equilibrium configurations of water clusters revealed that the cluster with n water molecules inherits the configuration of the clusters with $n - 1$ water molecules with an accuracy of one hydrogen bond.

Keywords: water clusters, numerical simulation, Monte Carlo method.

PACS: 61.20.Ja.

Received 4 March 2012.

English version: *Moscow University Physics Bulletin* 4(2012).

Сведения об авторах

1. Хахалин Андрей Владимирович — канд. физ.-мат. наук, ст. науч. сотрудник; тел.: (495) 939-40-34, e-mail: avkhakhalin@mail.ru.
2. Королёва Александра Валерьевна — аспирантка; тел.: (495) 939-40-34, e-mail: likky7371@rambler.ru.
3. Шалабаева Виктория Тимуровна — студентка; тел.: (495) 939-40-34, e-mail: shvictoria@mail.ru.
4. Ширшов Ярослав Николаевич — вед. инженер; тел.: (495) 939-40-34, e-mail: yns@bk.ru.