Письма в ЖЭТФ, том 98, вып. 5, с. 296 – 302

О поведении индикаторов плавления системы Леннарда–Джонса в окрестности фазового перехода

Б. А. Клумов

Институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 13 мая 2013 г.

После переработки 27 июня 2013 г.

Рассматриваются различные индикаторы плавления системы частиц, парное взаимодействие между которыми описывается потенциалом Леннарда–Джонса. В области перехода кристалл–жидкость подробно исследуется поведение парной корреляционной функции $g(r)$ и ассоциированных с ней критериев плавления, модифицированного критерия Линдеманна и критериев, основанных на свойствах ближнего ориентационного порядка (вращательные инварианты q_l и w_l разного ранга l). Предлагается параметр, характеризующий переход кристалл–жидкость, основанный на потере атомом/частицей своих ближайших соседей. В заключение приводится сравнение всех рассмотренных индикаторов плавления системы Леннарда–Джонса. Показано, что индикаторы плавления, выведенные из свойств ближнего ориентационного порядка, намного чувствительнее к указанному переходу и их можно использовать для построения новых феноменологических критериев плавления наподобие критерия Линдеманна. Дополнительным важным преимуществом таких кумулянтов является то, что для их вычисления нужно очень небольшое по современным меркам число конфигураций системы.

DOI: 10.7868/S0370274X13170049

Плавление вещества (фазовый переход кристалл—жидкость) принадлежат к наиболее важным и фундаментальным разделам физики конденсированного состояния (см., например, [1]). Структурные особенности, особенно свойства ближнего порядка, при таком переходе еще окончательно не выявлены даже для относительно простых систем, таких, как твердые сферы [2, 3], заряженные микрочастицы (к которым относится коллоидная [4, 5] и комплексная [6–8]) плазма, системы Леннарда–Джонса (см., например, [9–14]), системы с обратным степенным парным взаимодействием ($U \propto r^{-n}$) (см., например, [15]) и т.д. В настоящей работе основное внимание фокусируется на поведении различных параметров (индикаторов плавления), характеризующих плавление системы Леннарда–Джонса. Указанные параметры в основном определяются исходя из свойств ближнего порядка (трансляционного и ориентационного).

Здесь рассматривается система частиц с парным потенциалом взаимодействия $U_{\rm LJ}(r)$ Леннарда–Джонса (LJ) (в безразмерном виде он записывается как $U_{\rm LJ}(r) = 4(r^{-12} - r^{-6})$ (см., например, [16]). Применяется стандартный метод молекулярной динамики, который описывает поведение системы Леннарда–Джонса в кубическом термостате размером L при постоянных температуре T^* и плотности ρ^* (так называемый NVT-ансамбль) с использованием периодических граничных условий. Моделирование проводилось для разного числа частиц: $N = 4000$, 2048 и 1372 (для того чтобы исключить размерные эффекты). В начальный момент времени они были расположены в узлах кубической гранецентрированной (ГЦК) решетки. Температура системы увеличивалась на небольшой шаг $\delta T \simeq 10^{-2}$. Для каждой температуры T^* находились квазиравновесные конфигурации частиц, которые использовались как начальные для расчета конфигураций при $T* = T^* + \delta T$. Указанные конфигурации использовались для вычисления параметров, характеризующих структурные свойства системы.

Свойства трансляционного ближнего порядка. Рассмотрим сначала поведение системы LJ в области перехода кристалл–жидкость на примере парной корреляционной функции $g(r)$, усредненной по углам (RDF, *radial distribution function*). На рис. 1 показана характерная 2D-зависимость RDF от r и T^* в области перехода. Хорошо видна резкая перестройка парной корреляционной функции с потерей дальнего порядка – переход от кристаллического состояния (*solid-like*) к жидкостному (*liquid-like*). Он наблюдается при одной и той же температуре $T^*_m \simeq 1.6$ (для плотности $\rho^* \simeq 1$) и, как можно показать, для всех пространственных масштабов. Отсюда, в частности, следует важный вывод: плавление системы LJ можно описывать в терминах свойств ближне-

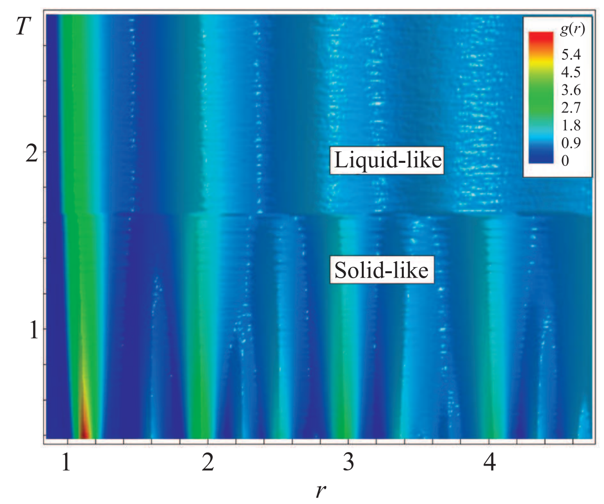

Рис. 1. (Цветной онлайн) Парная корреляционная функция $g(r)$ в зависимости от температуры T^* в окрестности перехода кристалл–жидкость. Цвет соответствует величине $g(r)$. Резкое изменение $g(r)$, наблюдаемое при $T^* \simeq 1.6$ на всех пространственных масштабах, отвечает плавлению системы LJ. Плотность $\rho^* = 1$

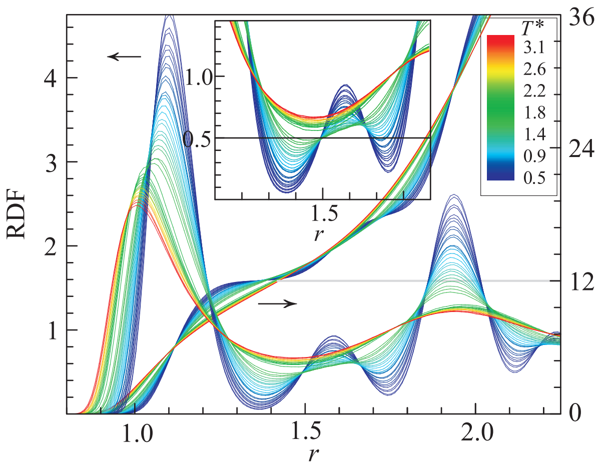

Рис. 2. (Цветной онлайн) Парная корреляционная функция $g(r)$ системы LJ в зависимости от температуры T^* в окрестности фазового перехода кристалл–жидкость. Температура T^* растет от синего цвета к красному. Шаг по температуре $\delta T^* \simeq 2 \cdot 10^{-2}$. На вставке – поведение $g(r)$ в окрестности первого ненулевого минимума $g_{\min}$. Показано также поведение кумулянта $N(<r) \equiv \int_0^r 4\pi r^2 g(r) dr$ при тех же температурах. Горизонтальная серая линия на вставке соответствует значению $N(<r) = 12$. Плотность системы LJ $\rho^* = 1$

го порядка, т.е. исследуя свойства частиц, находящихся в первой координационной сфере. Это сильно упрощает задачу нахождения точки (области) перехода кристалл–жидкость. С парной корреляционной функцией $g(r)$ обычно ассоциируется феноменологический критерий плавления и кристаллизации R [17], определяемый согласно выражению $R \equiv (g_{\min}/g_{\max})$, где $g_{\max}$ и $g_{\min}$ – первые максимум и ненулевой минимум $g(r)$ соответственно. Иногда для определения точки перехода удобно использовать величину R^{-1}. Плавлению (кристаллизации) системы LJ соответствует резкое уменьшение (рост) этого индикатора до значений $R^{-1} \simeq 5$. Дополнительно к параметру R для описания фазового перехода можно использовать параметр $g_{\min}$. Согласно предположению [18] плавление системы LJ происходит при $g_{\min} = 0.5$, когда пропадают физически осмысленные решения уравнения Орнштейна–Цернике. Более детально поведение функции $g(r)$ в области фазового перехода показано на рис. 2. Разница в температуре δT^* между соседними кривыми постоянна ($\delta T^* \simeq 2 \cdot 10^{-2}$, температура растет от синего цвета к красному). Хорошо прослеживается поведение параметров $g_{\max}$ и $g_{\min}$ при повышении температуры. На вставке к рис. 2 в деталях показано поведение $g(r)$ в окрестности ее первого ненулевого минимума $g_{\min}$. Отчетливо виден скачок $g_{\min}$ при плавлении системы, который наблюдается при $g_{\min} \simeq 0.5$. Это делает величину $g_{\min}$ еще одним удобным индикатором плавления. На рис. 2 показано также поведение кумулянта $N(<r) \equiv \int_0^r 4\pi r^2 g(r) dr$ (который равен среднему числу частиц в сфере радиуса r). Хорошо видно, что в области фазового перехода в первой координационной сфере находится в среднем 12 частиц ($N_{\rm nn} = 12$). Другой интересной метрикой, которая, как будет показано ниже, тоже может быть использована для описания плавления, является параметр $\mathcal{C}$, связанный с потерей частицей своих ближайших соседей при нагреве системы (*bond breakage order parameter* [19]). В кристаллическом состоянии частица редко меняет своих соседей (частицы находятся в “клетке” (*cage*) из ближайших соседей; для твердотельной системы LJ характерна решетка ГЦК (fcc) или ГПУ (hcp), а $N_{\rm nn} = 12$). Однако при нагреве и приближении к точке фазового перехода темп обмена соседними частицами резко увеличивается. Определим параметр $\mathcal{C}$ как относительное число частиц ($N_c/N_{\rm tot}$, где $N_{\rm tot}$ – полное число частиц в системе), которые за достаточно большое время эволюции системы LJ ($\delta_c \gg D/v$, где D– среднее межчастичное расстояние, а v – характерная скорость частицы) поменяли хотя бы одного из ближайших соседей (для $N_{\rm nn} = 12$): $\mathcal{C} = N_c/(N_{\rm tot}\delta_c)$. Интуитивно понятно, что в жидкостной фазе темп образования таких частиц будет значительно больше, чем в кристаллической. На рис. 3 представлены температурные зависимости индикаторов плавления системы LJ, рассмотренных выше (R^{-1}, $g_{\min}$ и $\mathcal{C}$).

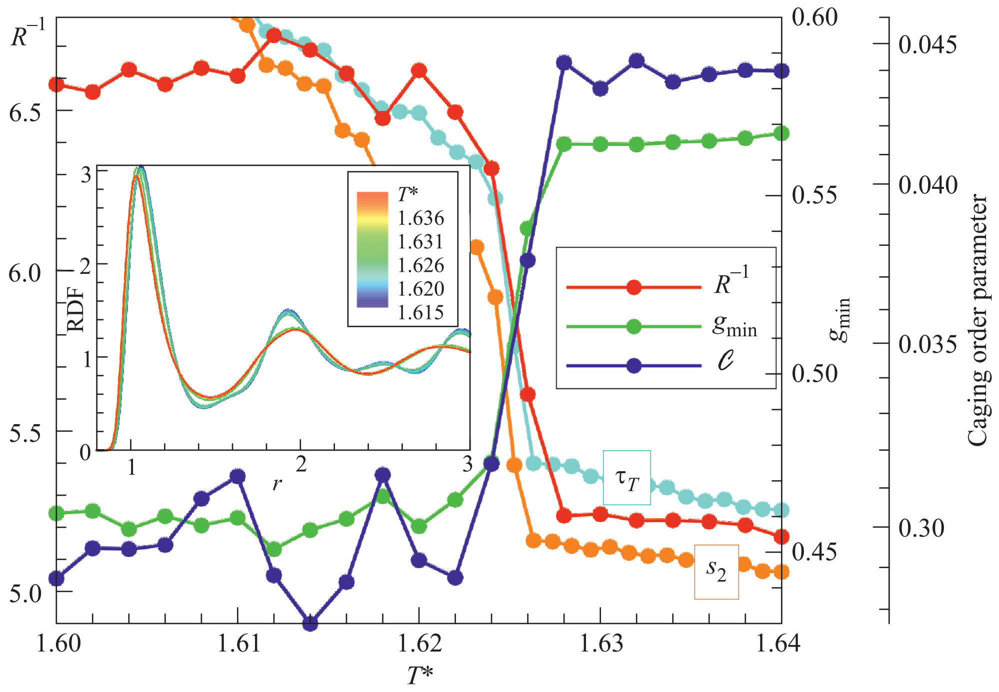

Рис. 3. (Цветной онлайн) Различные индикаторы плавления системы LJ в зависимости от температуры T^*. На вставке показано, как меняется парная корреляционная функция $g(r)$ в рассмотренном диапазоне температур. Заметные вариации параметра $\mathcal{C}$ при $T^* \leq T_m$ отражают уровень флуктуаций указанной метрики плавления. Также приведены температурные зависимости трансляционного параметра τ_T (голубая линия) и избыточной парной энтропии s_2 (оранжевая линия). Плотность системы LJ $\rho^* = 1$

Там же приведены температурные зависимости модифицированных трансляционного параметра τ_T [20] и избыточной парной энтропии s_2. Оба эти параметра определяются из $g(r)$ как $\tau_T \propto \int_0^{r_c} |g(r) - 1| dr$, где $r_c/D \simeq 4$, и $s_2 \propto \int \{g(r) \ln[g(r)] - g(r) + 1\} d\mathbf{r}$ [21]. Видно, что для рассмотренных температур T^* все индикаторы испытывают резкое изменение в области фазового перехода ($T^* \simeq T_m \simeq 1.625$) и относительно слабо меняются до и после него. Рост параметра $\mathcal{C}$, очевидно, связан с появлением в системе мобильных частиц. Для выявления их роли в плавлении системы рассмотрим, как меняется при нагреве распределение (PDF, *probability distribution function*) ближайших соседей в P-зависимости от их расстояния r_{nn} до центральной (*caged*) частицы. На рис. 4 показаны такие нормированные PDF ($\int_0^\infty P dr = 1$) при разных температурах для ближайших 12 (сплошные линии) и 11 (пунктирные линии) соседей. Удобно ввести кумулятивные метрики, характеризующие эти PDF. Определим "полуширину" распределений l_P (которые являются существенно негауссовыми) из выражения $l_P = l_{P,2} - l_{P,1}$, где $l_{P,1}$ и $l_{P,2}$ – кумулянты указанных PDF, так что $\int_0^{l_{P,1}} P dr = 1/4$ и $\int_0^{l_{P,2}} P dr = 3/4$. Такие зависимости l_P, вычисленные для PDF с 12 и 11 ближайшими соседями, показаны на вставке к рис. 4. Видно, что в области фазового перехода данные зависимости практически идентичны. Это позволяет сделать

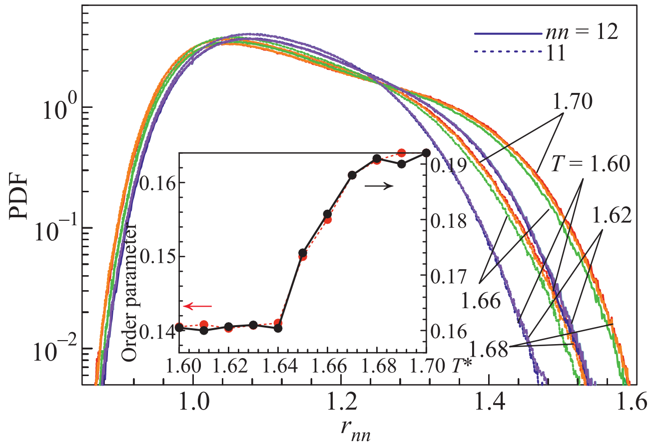

Рис. 4. (Цветной онлайн) Функции распределения (PDF) 12 (сплошные линии) и 11 (пунктир) ближайших соседей в зависимости от расстояния r_{nn} для ряда температур T^* вблизи перехода кристалл–жидкость для системы LJ. Вставка – параметр l_P в зависимости от температуры (черная и красная кривые отвечают PDF с 12 и 11 ближайшими соседями соответственно). Плотность системы LJ $\rho^* = 1$

важный вывод (по крайней мере при рассмотрении NVT LJ-ансамблей) о том, что рассмотренные индикаторы плавления, основанные на поведении вакансий, не дают качественно новой информации о фазовом переходе.

Понятно, что можно характеризовать плавление, используя и распределения $k_{\rm nn}$ ближайших соседей (где $k_{\rm nn} = 1, 2, ...$) по $r_{\rm nn}$. Однако подобное рассмотрение не дает никаких дополнительных преимуществ по сравнению со случаем $k_{\rm nn} = 12$. Отметим, что такая метрика (при $k_{\rm nn} = 12$) является модифицированным параметром Линдеманна. Однако в отличие от канонического критерия Линдеманна $\mathcal{L}$ [22], который связывает плавление твердого тела с превышением среднеквадратичным смещением δ_L атомов (относительно их равновесного положения) некоторой пороговой величины ($\mathcal{L} = \delta_L/D \simeq 0.15$, где D – среднее межчастичное расстояние), являющейся почти универсальной для широкого класса потенциалов взаимодействия, предлагаемые метрики, как можно показать, не требуют детальной динамической информации для своего вычисления.

При плавлении резко уменьшается число твердотельных (*solid-like*) частиц. Важным индикатором фазового перехода могут быть распределения ближайших 12 соседей по их фазовому состоянию (например, твердотельные частицы можно определить как частицы с величиной вращательного инварианта [8] $q_6 \geq q_6^s \simeq 0.45$; если же $q_6 < q_6^s \simeq 0.45$, то частица считается жидкостной). На рис. 5 представлены та-

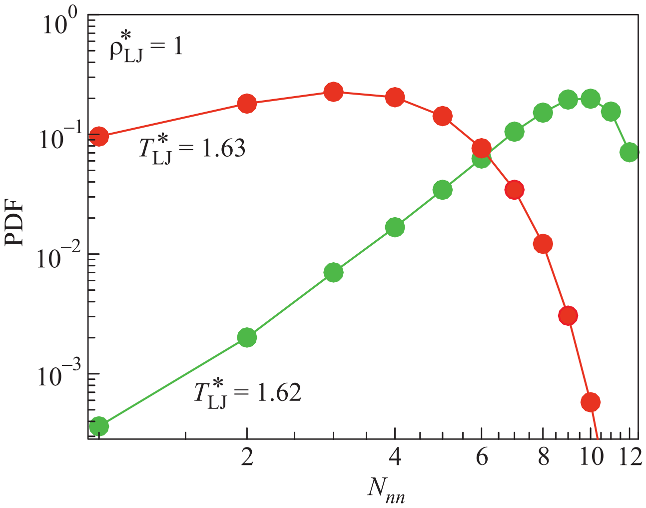

Рис. 5. (Цветной онлайн) Распределение частиц $n^s_{\rm nn}$ по числу твердотельных (с $q_6 \geq 0.45$) ближайших соседей $N_{\rm nn}$ для жидкостной (красная линия) и твердотельной (зеленая линия) фаз. Плотность системы LJ $\rho^* = 1$

кие распределения твердотельных частиц $n^s_{\rm nn}$ по числу твердотельных ближайших соседей для двух фаз системы LJ в окрестности фазового перехода: кристаллической и расплава. Хорошо видно, что плавление кардинально меняет указанное распределение, приводя, в частности, к экспоненциальному спаду $n^s_{\rm nn}$ для $N_{\rm nn} \geq 8$. Это означает, что характеристики таких распределений могут быть использованы для описания перехода кристалл–жидкость.

Ориентационный ближний порядок. Плавление системы LJ сопровождается не только потерей дальнего трансляционного порядка, но и резким разрушением ближнего ориентационного порядка в узкой области температур. На рис. 6 показано, как

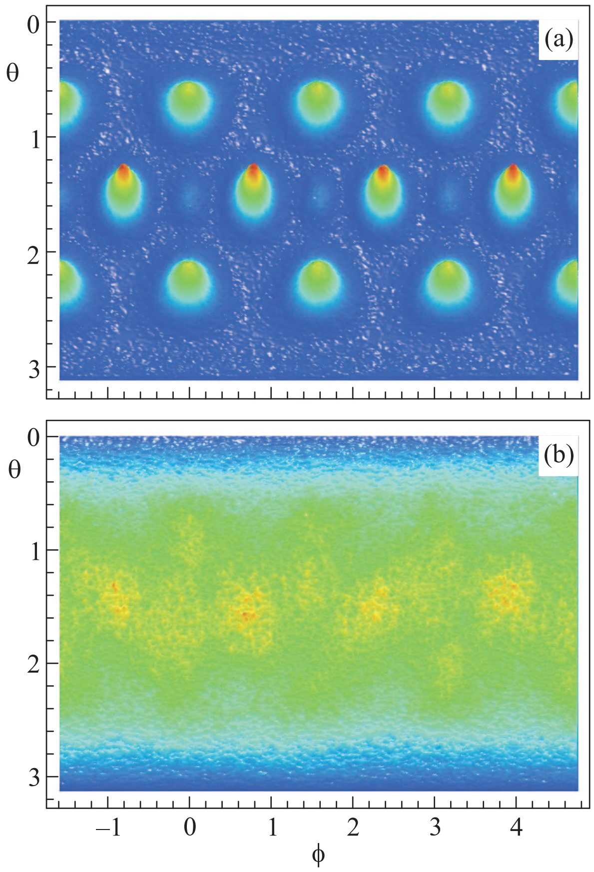

Рис. 6. (Цветной онлайн) Плотность углового распределения ближайших 12 соседей на плоскости $(\phi\theta)$ для твердотельной (a) ($T^* \simeq 1.65$) фазы и расплава (b) ($T^* \simeq 1.66$). Видно полное разрушение ориентационного порядка при фазовом переходе кристалл–жидкость. Плотность $\rho^* = 1$

разрушается ближний ориентационный порядок при плавлении системы LJ. На нем представлена плотность углового распределения ближайших соседей ($N_{\rm nn} = 12$) для двух температур ($T_1^* < T_m^* < T_2^*$) на плоскости $(\phi\theta)$, где ϕ, θ – полярный и азимутальный углы, характеризующие положение соседних частиц в 3D-пространстве. Для твердотельной фазы (рис. 6a) расположение ближайших соседей соответствует решетке ГЦК (fcc), которая легко идентифицируется. В расплаве (рис. 6b) практически отсутствуют предпочтительные направления для соседних частиц (фазовое пространство ($\phi\theta$) близко к однородному). Угловые характеристики ближайших соседей удобно описывать с помощью вращательных инвариантов [23, 24]. Вектора $\mathbf{r}_{ij}$, соединяющие i-ю частицу с ближайшими соседями ($j = 1, \dots, N_{\rm nn}$), позволяют определить набор параметров, характеризующих ближний ориентационный порядок (*bond order parameters*) $q_{lm}(i)$ для каждого атома/частицы: $q_{lm}(i) = N_{\rm nn}^{-1} \sum_{j=1}^{N_{\rm nn}} Y_{lm}(\theta_j, \phi_j)$, где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – сферические гармоники, а θ и ϕ – угловые координаты j-й частицы. Используя параметры q_{lm}, легко вычислить вращательные инварианты второго (q_l) и третьего (w_l) ранга [23]. Важными характеристиками, по которым можно определить фазовое состояние разных систем (твердых сфер [25], трехмерной комплексной плазмы [8, 26, 27], систем Леннарда–Джонса [28–31]), являются функции распределения частиц $P(q_l)$ и $P(w_l)$ по разным вращательным инвариантам и их кумулятивные распределения $C_q^l(q_l)$ и $C_w^l(w_l)$, впервые предложенные автором в [8] для количественного описания плавления и кристаллизации плазменных кристаллов. На рис. 7 показаны типичные временные вариации вращательных инвариантов q_4, q_6, w_6 для твердотельной (ГЦК, fcc-*like*) и жидкостной (*liquid-like*) частиц вблизи фазового перехода. Видно (по поведению q_6 и q_4), что твердотельная частица (несмотря на то что визуально она выглядит как кристаллическая) значительную часть времени проводит и как ГПУ-подобная (hcp-*like*) частица, и как частица расплава. Длительное наблюдение за частицей, очевидно, позволит построить функции распределения $P(q_l)$ и $P(w_l)$, которые соответствуют температуре системы. Поэтому для описания перехода кристалл–жидкость в терминах ближнего ориентационного порядка совершенно естественно использовать такие PDF, а из всего набора $P(q_l)$ и $P(w_l)$ выбрать те, которые наиболее чувствительны к фазовому переходу. Следуя [8], для количественного описания плавления системы мы вводим кумулянты $C_q^l(q_l)$ (аналогично и для $C_w^l(w_l)$), определяемые согласно выражению

$$C_q^l(x) \equiv \int_{-\infty}^{x} P(q_l) dq_l.$$

Тогда индикатор фазового перехода конструируется, например, как значение рассматриваемого инварианта на полувысоте $q_l^{\rm hh}$ (или $w_l^{\rm hh}$ для инвариантов

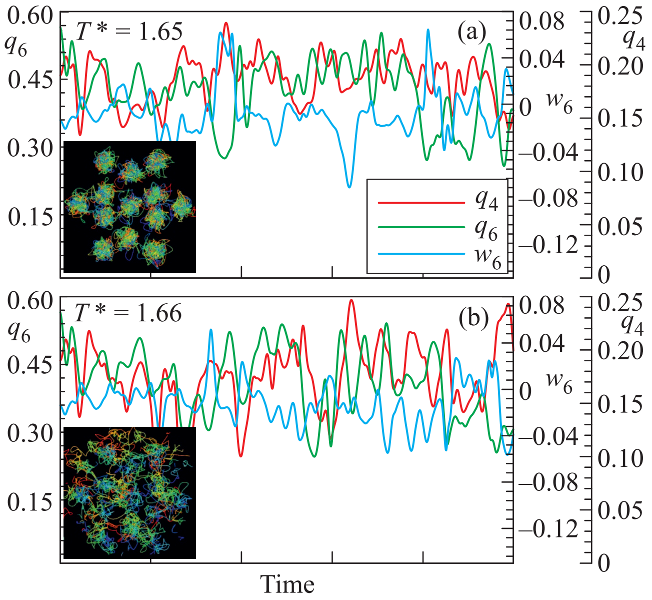

Рис. 7. (Цветной онлайн) Временная эволюция вращательных инвариантов q_4, q_6, w_6, вычисленных с фиксированным числом ближайших соседей ($N_{\rm nn} = 12$) для отдельной частицы из твердотельной (a) и жидкостной (b) фазы системы LJ. Вставки показывают траектории частицы и ее 12 соседей (траектории окрашены согласно времени t). Плотность системы $\rho^* = 1$

третьего рода) кумулятивного распределения (т.е. из условия $C_q^l(q_l^{\rm hh}) = 1/2$). Для твердотельной системы LJ характерна решетка ГЦК. Поэтому для описания фазового перехода удобно использовать нормированные метрики $\hat{q}_l = q_l^{\rm hh}/q_l^{\rm fcc}$ и $\hat{w}_l = w_l^{\rm hh}/w_l^{\rm fcc}$. Приведем редко используемые значения $q_l^{\rm fcc}$ и $w_l^{\rm fcc}$ для $l = 8$ и 12: $q_8^{\rm fcc} \approx 0.4$, $q_{12}^{\rm fcc} \approx 0.6$ и $w_8^{\rm fcc} \approx 0.058$, $w_{12}^{\rm fcc} \approx 0.087$ (для $l = 4$ и 6 величины q_l и w_l для разных типов кристаллических решеток приведены, например, в [32, 33]). Зависимости ряда индикаторов $\hat{q}_l$ и $\hat{w}_l$ от температуры в области перехода кристалл–жидкость представлены на рис. 8. Хорошо видно, что наиболее чувствительным к фазовому переходу является параметр $\hat{w}_6$. Этот параметр взрывным образом растет в области перехода: твердотельному состоянию системы соответствует значение $\hat{w}_6 \approx 1$, а жидкостному – значение $\hat{w}_6 \simeq 3$. Остальные рассмотренные кумулянты также испытывают резкое изменение при плавлении (отметим $\hat{w}_4$ и $\hat{w}_8$). Однако их вариации в области перехода гораздо слабее, чем в случае $\hat{w}_6$. Именно его и естественно использовать для характеризации разрушения ближнего ориентационного порядка при плавлении.

Отметим, что для вычисления указанных кумулянтов с хорошей точностью требуется (в отличие от индикаторов плавления, ассоциированных с пар-

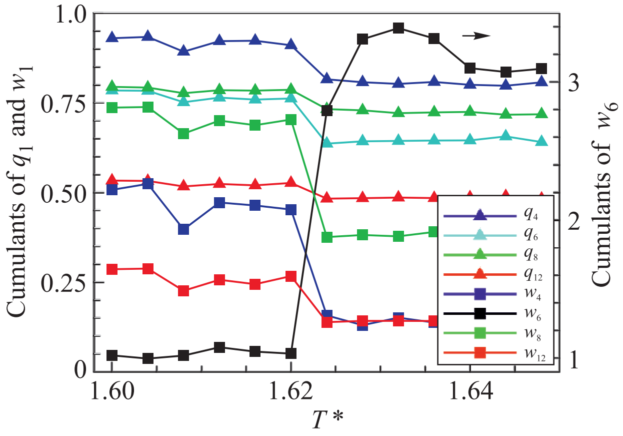

Рис. 8. (Цветной онлайн) Поведение параметров $\hat{q}_l$ и $\hat{w}_l$ в зависимости от температуры при плавлении системы LJ

ной корреляционной функцией) совсем немного статистических данных. Это иллюстрирует рис. 9. На

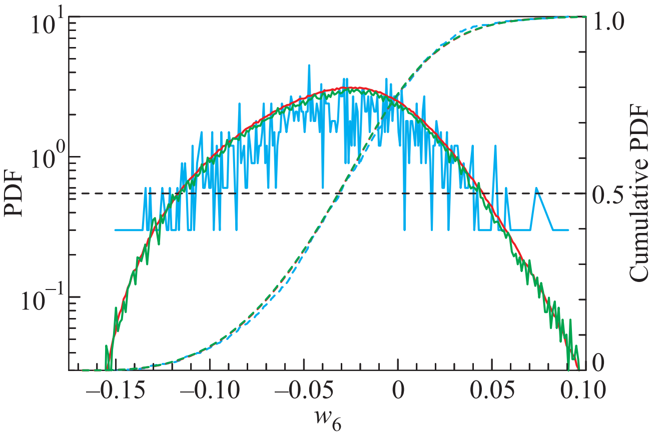

Рис. 9. (Цветной онлайн) Распределение $P(w_6)$ частиц жидкостной системы LJ при $T^* \simeq 1.7$ и $\rho^* = 1$ в зависимости от числа частиц N, используемых для вычисления $P(w_6)$ ($N \sim n_{\rm cfg} \cdot N_{\rm tot}$, где $N_{\rm tot}$, $n_{\rm cfg}$ – полное число частиц и число исследуемых конфигураций системы). Кривые соответствуют $N \simeq 10^7$ (красная линия), 10^5 (зеленая линия) и 10^3 (синяя линия). Пунктиром показаны кумулятивные распределения от $P(w_6)$ для указанных N

нем показано несколько распределений $P(w_6)$ и их кумулянтов для жидкостной системы LJ в зависимости от числа частиц N, используемых для вычисления $P(w_6)$. Хорошо видно, что кумулянты от $P(w_6)$ практически совпадают для всех рассмотренных N, даже если исходное распределение $P(w_6)$ очень сильно зашумлено (как, например, в случае $N \simeq 10^3$). Это делает кумулянты прекрасной метрикой, характеризующей фазовое состояние системы. Подчеркнем, что для вычисления кумулянта с разумной точностью требуется относительно скромное ($N \sim 10^3$) число частиц. Это очень важное преимущество кумулянтов перед, например, индикаторами плавления, ассоциированными с парной корреляционной функцией R^{-1} и $g_{\rm min}$ (см. выше), для вычисления которых требуется значительно большее число частиц ($N \gg 10^3$). Фактически достаточно одной конфигурации системы (мгновенного снимка) с координатами примерно $N \sim 10^3$ частиц (что на сегодняшний день является скромным параметром даже для *ab initio* MD-расчетов) для того, чтобы с помощью кумулянтов от распределений $P(w_l)$ и $P(q_l)$ определить фазовое состояние системы.

Итак, в настоящей работе на основе детального моделирования методом молекулярной динамики рассмотрены различные индикаторы плавления системы Леннарда–Джонса. Впервые предложено использовать в качестве такого индикатора распределение частиц $n^s_{\rm nn}$ по числу твердотельных (жидкостных) ближайших соседей. Рассмотрено поведение в области перехода ряда параметров, ассоциированных с парной корреляционной функцией $g(r)$, таких, как R^{-1}, $g_{\rm min}$, τ_T и s_2, и ориентационным ближним порядком (q_l, w_l). Все указанные параметры испытывают резкое изменение при плавлении системы LJ. Однако наиболее чувствительным (из рассмотренных) индикатором фазового перехода (и фазового состояния системы, в частности) является параметр $\hat{w}_6$, характеризующий ближний ориентационный порядок и являющийся кумулянтом функции распределения $P(w_6)$. Взрывной рост параметра $\hat{w}_6$ при плавлении системы LJ позволяет построить критерий плавления на его основе. Важным преимуществом указанного индикатора является то, что он может быть легко вычислен с высокой точностью даже при очень небольшом числе конфигураций системы. Фактически для системы с числом частиц $N \sim 10^3$ достаточно одного мгновенного снимка для определения ее фазового состояния.

Автор благодарен А.З. Паташинскому за плодотворные дискуссии. Данное исследование было частично поддержано президиумом и отделением физических наук РАН, Министерством образования и науки РФ и Российским фондом фундаментальных исследований (гранты # 13-02-00913 и 13-02-01099).

1. S. M. Stishov, Sov. Phys. Usp. **17**, 625 (1975).
2. G. Parisi and F. Zamponi, Rev. Mod. Phys. **82**, 789 (2010).
3. S. Torquato and F. H. Stillinger, Rev. Mod. Phys. **82**, 2633 (2010).
4. A. Blaaderen and P. Wiltzius, Science **270**, 1177 (1995).

5. U. Gasser et al., Science **292**, 5515 (2001).
6. V. E. Fortov and G. E. Morfill, *Complex and Dusty Plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press 2010.
7. M. Rubin-Zuzic et al., Nature Phys. **2**, 181 (2006).
8. B. A. Klumov, Phys. Usp. **53**, 1053 (2010) [Usp. Fiz. Nauk **180**, 1095 (2010)].
9. J. E. Lennard-Jones, Proc. Roy. Soc. A **106**, 463 (1924).
10. J. P. Hansen and L. Verlet, Phys. Rev. **184**, 151 (1969).
11. J. P. Hansen, Phys. Rev. A **2**, 221 (1970).
12. J. D. Honeycutt and H. C. Andersen, J. Chem. Phys. **91**, 4950 (1987).
13. J. R. Errington, P. J. Debenedetti, and S. Torquato, J. Chem. Phys. **118**, 2256 (2003).
14. J. P. Hansen and I. R. McDonald, *Theory of simple liquids*, Elsevier, USA, 2006.
15. F. Saija, S. Prestipino, and P. V. Giaquintac, J. Chem. Phys. **124**, 244504 (2006).
16. B. Smit and D. Frenkel, *Understanding Molecular Simulation*, Academic, San Diego, 2002.
17. H. J. Raveche, R. D. Mountain, and W. B. Streett, J. Chem. Phys. **61**, 1970 (1974).
18. G. A. Martynov and G. N. Sarkisov, Phys. Rev. B **42**, 2504 (1990).
19. E. Rabani, J. D. Gezelter, and B. J. Berne, Phys. Rev. Lett. **82**(18), 3649 (1999).
20. T. M. Truskett, S. Torquato, and P. G. Debenedetti, Phys. Rev. E **62**(1), 993 (2000).
21. A. M. Schmidt, J. Chem. Phys. **99**(5), 4225 (1993).
22. F. A. Lindemann, Phys. Z. **11**, 609 (1910).
23. P. Steinhardt, D. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. Lett. **47**, 1297 (1981); P. Steinhardt et al., Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
24. A. C. Mitus et al., J. Phys.: Cond. Matt. **5**, 8509 (1993); A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **87**, 179 (1982); A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **88**, 31 (1983).
25. B. A. Klumov, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rev. B **83**, 184105 (2011).
26. S. A. Khrapak et al., Phys. Rev. Lett. **106**, 205001 (2011).
27. S. A. Khrapak et al., Phys. Rev. E **85**, 066407 (2012).
28. S. Nose and F. Yonezawa, J. Chem. Phys. **84**, 1803 (1983).
29. M. D. Rintoul and S. Torquato, J. Chem. Phys. **105**, 9528 (1996).
30. P. R. ten Wolde, R. J. Ruiz-Montero, and D. Frenkel, J. Chem. Phys. **104**, 9932 (1996).
31. Б. А. Клумов, Письма в ЖЭТФ **97**, 372 (2013).
32. B. A. Klumov and G. Morfill, JETP Lett. **96**, 444 (2009); B. A. Klumov and G. Morfill, JETP Lett. **107**, 908 (2008).
33. B. A. Klumov et al., Plasma Phys. Contol. Fusion **51**, 124028 (2009); B. A. Klumov et al., EPL **92**, 15003 (2010).