Письма в ЖЭТФ, том 114, вып. 7, с. 467 – 473

Об идентификации искаженных кристаллических кластеров

Б. А. Клумов[1)]

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 26 августа 2021 г.
После переработки 30 августа 2021 г.
Принята к публикации 31 августа 2021 г.

Модифицированный метод вращательных инвариантов используется для идентификации искаженных кристаллических кластеров в неупорядоченных средах. Предлагается новый способ определения таких кластеров, включая трудно определяемые обычными методами искаженные ОЦК (bcc) кристаллиты. Особенностью таких кластеров является вторая оболочка из 6 частиц, которая может при тепловом искажении объединяться с первой оболочкой, что сильно усложняет идентификацию подобных кристаллитов, однако, как показано в настоящей работе, комбинированное использование вращательных инвариантов второго рода q_4 и q_6 и третьего рода w_4 и w_6 позволяет достаточно просто решить эту проблему.

DOI: 10.31857/S1234567821190046

Идентификация кристаллических кластеров в веществе – одна из важных проблем физики конденсированного состояния. Начиная с недавней пионерской работы [1], доступны методы экспериментального определения положений отдельных атомов в аморфных веществах (металлических стеклах). И если в [1] число наблюдаемых кластеров из атомов исчислялось десятками, то на сегодняшний день определить пространственное положение атомов стало возможным для нескольких десятков тысяч частиц [2], т.е. твердые аморфные вещества уже сегодня можно изучать на самом детальном уровне – на уровне отдельных атомов. То же самое наблюдается и в вычислительном эксперименте, значение которого в изучении свойств конденсированного вещества неуклонно растет. Важную роль в определении связи между структурой твердого вещества и его физическими свойствами играют свойства ближнего и среднего ориентационных порядков, которые дают наиболее полное описание пространственного расположения атомов и их окружения. Целью настоящей работы является создание метода надежного выявления различных кристаллических фаз в неупорядоченных системах с учетом возможного искажения кристаллических кластеров, которое может быть довольно значительным как при нагреве твердого тела, так и при при его образовании в процессе кристаллизации из расплава.

Здесь основным инструментом получения конфигураций атомов является метод классической молекулярной динамики, реализованный для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодическими граничными условиями [3]. Типичное число частиц в исследуемых системах $N \sim 10^5$. При изучении структурных свойств искаженных плотноупакованных кластеров ГЦК (fcc) и ГПУ (hcp) парное взаимодействие частиц описывалось потенциалом Леннард–Джонса (который в безразмерном виде имеет вид $U_{\mathrm{LJ}}(r) = 4(1/r^{12} - 1/r^6)$). При исследовании структуры ОЦК (bcc) кристаллитов использовался потенциал Дебая–Хюккеля (Юкавы) ($U(r) = (Q/r)\exp(-r/\lambda)$, где Q – заряд частицы, а λ – длина экранирования). Известно, что для малых значений параметра экранировки $\kappa \sim 1$ твердотельной фазе системы Юкавы соответствует bcc решетка [4]. Здесь $\kappa \equiv D/\lambda$, а D – среднее межчастичное расстояние в системе.

Особое внимание здесь уделяется поиску ОЦК-подобных (bcc-like) кластеров. Это связано с тем, что идентификация таких кластеров в веществе часто бывает затруднена вследствие тепловой деформации второй координационной оболочки и ее объединения с первой. Вторая оболочка bcc кристалла состоит из 6 атомов (в первой – находится 8 атомов) и она находится рядом (на расстоянии $\sqrt{4/3}D \simeq 1.15D$) с первой координационной оболочкой. При нагреве и/или кристаллизации обе оболочки часто объединяются и становятся неразличимы; такое искажение bcc решетки требует специальных методов для ее идентификации.

Для описания ближнего ориентационного порядка и определения типа различных кристаллических

1)e-mail: klumov@ihed.ras.ru

кластеров будем использовать метод вращательных инвариантов (часто еще называемый методом BOOP (Bond Orientational Order Parameter)). Этот метод был предложен в работах [5–8] и широко используется для количественного описания ближнего и среднего ориентационных порядков в самых разных системах, таких как система Леннард–Джонса [9–11], твердые сферы [12–15], коллоидная [16–18] и комплексная (пылевая) плазма [19–24], металлические стекла [1, 25–29], гранулированные системы [30, 31], жидкости с аномальными свойствами [32, 33] и др. На сегодняшний день это один из самых используемых методов для описания ближнего ориентационного порядка. Это, в частности, связано с тем, что он очень чувствителен к наличию угловых корреляций среди ближайших соседей.

В рамках этого метода для каждой i-й частицы сначала определяется число $n_{\rm nn}(i)$ ближайших соседей. Вектора $\mathbf{r}_{ij}$, соединяющие i-частицу с ближайшими соседями ($j = 1,\ n_{\rm nn}$), позволяют определить локальный ориентационный параметр $q_{lm}(i)$ для каждого атома или частицы согласно:

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N_b(i)} \sum_{j=1}^{N_b(i)} Y_{lm}(\theta_j, \phi_j), \qquad (1)$$

где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – сферические гармоники, θ, ϕ – угловые координаты j-й частицы, определяемые вектором $\mathbf{r}_{ij}$.

Отметим, что определяемый таким образом локальный ориентационный порядок зависит только от двух параметров – углового распределения ближайших соседей θ_i и ϕ_i, а расстояние до ближайших соседей входит только неявно при их определении. Обычно ближайшими соседями считаются частицы, которые находятся в первой координационной сфере данного атома. Для каждой частицы, используя $q_{lm}(i)$, можно вычислить вращательные инварианты второго $q_l(i)$ и третьего $w_l(i)$ рода:

$$q_l(i) = \left(\frac{4\pi}{(2l+1)} \sum_{m=-l}^{m=l} |\, q_{lm}(i)|^2 \right)^{1/2}, \qquad (2)$$

$$w_l(i) = \sum_{\substack{m_1, m_2, m_3 \\ m_1+m_2+m_3=0}} \begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix} \times q_{lm_1}(i) q_{lm_2}(i) q_{lm_3}(i), \qquad (3)$$

где $\begin{pmatrix} l & l & l \\ m_1 & m_2 & m_3 \end{pmatrix}$ – Вигнеровские $3j$-символы; в последнем уравнении суммирование производится по всем индексам $m_i = -l, ..., l$, которые удовлетворяют условию: $(m_1 + m_2 + m_3) = 0$. Определенные таким образом вращательные инварианты и являются численной характеристикой ближнего ориентационного порядка. Отметим, что при таком определении каждый тип кристаллической решетки имеет свой уникальный набор вращательных инвариантов q_l и w_l. Это и дает возможность определить наблюдаемую в эксперименте или численном моделировании упорядоченную структуру, сравнивая значения q_l, w_l, вычисленные для каждой частицы с величинами $q_l^{\rm id}$, $w_l^{\rm id}$ для идеальных решеток. Для идентификации кристаллической структуры в простых системах обычно достаточно использовать вращательные инварианты второго рода q_4, q_6, инварианты третьего рода w_4, w_6 используются в литературе значительно реже. Для совершенных кристаллических решеток вращательные инварианты q_l и w_l могут быть достаточно легко вычислены. Они приводятся в табл. 1 для ряда идеальных кристаллических решеток.

Если рассматривать кристаллические кластеры с плотной упаковкой (NN = 12), то самые высокие значения $q_6 \simeq 0.66$ у икосаэдра – важного структурного элемента квазикристаллической фазы в металлических стеклах [1, 25, 34] и переохлажденных жидкостях. Величину q_6 часто используют для описания степени порядка в системе частиц, поскольку для полностью неупорядоченной системы (газовая фаза) среднее значение $q_6 \simeq 0.29$ (для NN = 12), а все значения параметра q_6 для твердотельных кластеров заметно больше.

В случае bcc решетки, учитывая ее важность и упомянутую выше сложность идентификации, в табл. 1 приводятся вращательные инварианты не только для первой координационной сферы (NN = 8) и для первых двух (NN = 14), но также и для случая, когда число ближайших соседей NN = 12. Довольно часто встречаются системы, в которых одновременно сосуществуют несколько твердотельных фаз (например, fcc, hcp, bcc). Такое наблюдается, например, в экспериментах с плазменными кристаллами [21] и коллоидной плазмой [18]. В плотной системе твердых сфер вблизи предела Бернала одновременно сосуществуют fcc и hcp кластеры [14] и т.д. В таких случаях, удобно с практической точки зрения определять твердотельные кластеры в системе, вычисляя вращательные инварианты с фиксированным числом ближайших соседей, характерным для плотной упаковки атомов (NN = 12).

Как легко можно показать, этому случаю для идеальной решетки bcc соответствуют только два

Таблица 1. Вращательные инварианты q_l и w_l ($l = 4,\ 6$) ряда идеальных кристаллических структур, вычисленные для фиксированного числа ближайших соседей (NN), которые указаны для каждого типа симметрии. Представлены значения q_4, q_6, w_4, w_6 для следующих решеток: гексагональная плотная упаковка (ГПУ, hcp), гранецентрированная кубическая (ГЦК, fcc), икосаэдрическая (ico), объемноцентрированая кубическая (ОЦК, bcc)

тип кристаллической решетки	q_4	q_6	w_4	w_6
ГПУ (hcp) (NN = 12)	0.097	0.485	0.134	−0.012
ГЦК (fcc) (NN = 12)	0.19	0.575	−0.159	−0.013
Икосаэдрическая (ico) (NN = 12)	1.4×10^{-4}	0.663	−0.159	−0.169
ОЦК (bcc) (NN = 8)	0.5	0.628	−0.159	0.013
ОЦК (bcc) (NN = 14)	0.036	0.51	0.159	0.013
ОЦК ($\mathrm{bcc}_{\mathrm{Voronoi}}$) (14 NN)	0.224	0.567	−0.159	0.013
ОЦК (bcc_1) (NN = 12)	0.137	0.559	−0.138	0.0043
ОЦК (bcc_2) (NN = 12)	0.1	0.542	−0.089	0.01

набора вращательных инвариантов, в которые вырождаются пятнадцать возможных комбинаций положений 6-ти атомов второй оболочки. Как можно показать, вращательные инварианты с величиной $q_6 \approx 0.137$ присутствуют только в 3 из 15 комбинаций – им соответствует конфигурация атомов из 12 частиц, в которой отсутствуют две частицы из второй оболочки, расположенные друг напротив друга (см. вставку на рис. 1a, где показаны ближайшие две координационные сферы у кластера bcc). Вращательные инварианты с $q_6 \approx 0.1$ – соответственно, присутствуют в 12 комбинациях и, как будет показано ниже, они при нагреве (и кристаллизации) bcc решетки доминируют. Этот красивый эффект является следствием симметрии bcc решетки и сильно упрощает поиск даже искаженных bcc-подобных кристаллитов в исследуемой системе.

На рисунке 1 показаны двумерные распределения частиц на плоскости вращательных инвариантов второго (q_4–q_6) (панель (a)) и третьего рода (w_4–w_6) (панель (b)), полученные для нагретых кристаллов: bcc, hcp и fcc. Все инварианты вычислены с фиксированным числом ближайших соседей $n_{\mathrm{nn}} \equiv 12$. Вращательные инварианты для идеальных решеток fcc, hcp, bcc также показаны для сравнения с искаженными решетками. Отсутствие заметных пересечений данных распределений позволяет надежно идентифицировать каждый тип искаженной кристаллической решетки, несмотря на значительный тепловой разброс каждого из распределений. На этом примере хорошо видно, что двумерные распределения (и особенно, комбинация двух распределений – на плоскостях (q_4–q_6) и (w_4–w_6)) гораздо точнее, чем одномерные, определяют тип кристаллита, образовавшегося в исследуемой системе. Таким образом, используя вращательные инварианты, вычисленные с $n_{\mathrm{nn}} = 12$ и указанные двумерные распределения (например, для кристаллизующегося вещества) можно сразу определить какой из типов кристаллической решетки характерен для рассматриваемой системы.

В работе [35] был предложен изящный способ обойти трудности, связанные с влиянием числа ближайших соседей n_{nn} на свойства вычисляемого с помощью метода вращательных инвариантов, ближнего ориентационного порядка. Для вычисления инвариантов q_l было предложено использовать метод многогранников Вороного (МВ или VT (Voronoi Tessellation)) [36] при поиске ближайших соседей. Метод VT не содержит никаких параметров, и поэтому проблема определения n_{nn} снимается – число ближайших соседей у заданного атома просто равно числу граней МВ, построенного методом VT. При этом, при вычислении инвариантов q_{lm} каждая частица j из ближайших соседей согласно [35] входит с весом δ_j, определяемым площадью грани многогранника Вороного s_j, на которую она опирается (см. в качестве примера вставку на рис. 1a, где показан многогранник Вороного для идеальной bcc решетки с $n_{\mathrm{nn}} = 14$):

$$q_{lm}(i) = \frac{1}{N_b(i)} \sum_{j=1}^{N_b(i)} \delta_j Y_{lm}(\theta_j, \phi_j). \qquad (4)$$

Удобно определить $\delta_j = n_{\mathrm{nn}} s_j / S_{\mathrm{tot}}$, где S_{tot} – площадь всех граней данного многогранника, так что $\sum_{k=1}^{n_{\mathrm{nn}}} \delta_k \equiv n_{\mathrm{nn}}$. При этом значения q_l и w_l не меняются для идеальных решеток fcc, hcp, ico, поскольку в этих решетках все 12 граней соответствующего многогранника Вороного имеют одинаковые площади. Для идеальной решетки bcc это не так (6-ти частицам из второй оболочки соответствуют меньшие площади МВ и, соответственно, меньший вклад в ве-

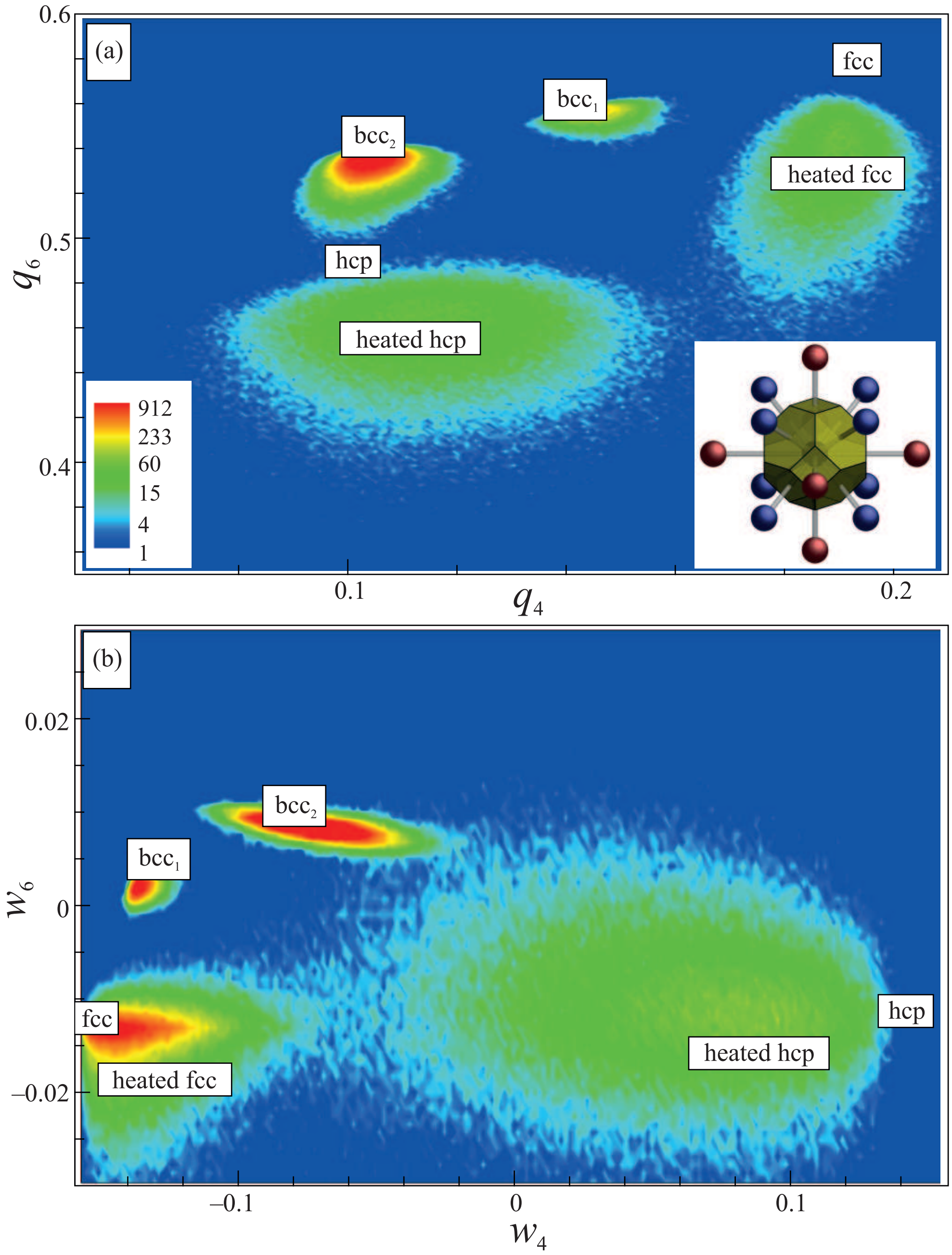

Рис. 1. (Цветной онлайн). Двумерные распределения частиц на плоскости вращательных инвариантов второго (q_4–q_6) (панель (a)) и третьего рода (w_4–w_6) (панель (b)) для ряда нагретых кристаллов: ОЦК (bcc), ГПУ (hcp) и ГЦК (fcc). Все инварианты вычислены с фиксированным числом ближайших соседей $n_{\rm nn} \equiv 12$. Вращательные инварианты для идеальных решеток fcc, hcp, bcc также приведены для сравнения с соответствующими искаженными решетками. В случае bcc (см. обсуждение в тексте) набор из 15-ти возможных комбинаций четырех атомов второй оболочки bcc решетки вырождается в два набора инвариантов (bcc$_1$ и bcc$_2$) разной интенсивности, что хорошо видно на представленных графиках. Отсутствие заметных пересечений данных распределений позволяет надежно идентифицировать каждый тип искаженной кристаллической решетки, несмотря на довольно значительное тепловое уширение указанных распределений. Вставка на панели (a) показывает пространственное распределение ближайших атомов в идеальной bcc решетке: 8 атомов из первой оболочки (выделены синим цветом) и 6 атомов из второй оболочки (красный цвет). Дополнительно для кластера bcc построен многогранник Вороного (см. обсуждение в тексте)

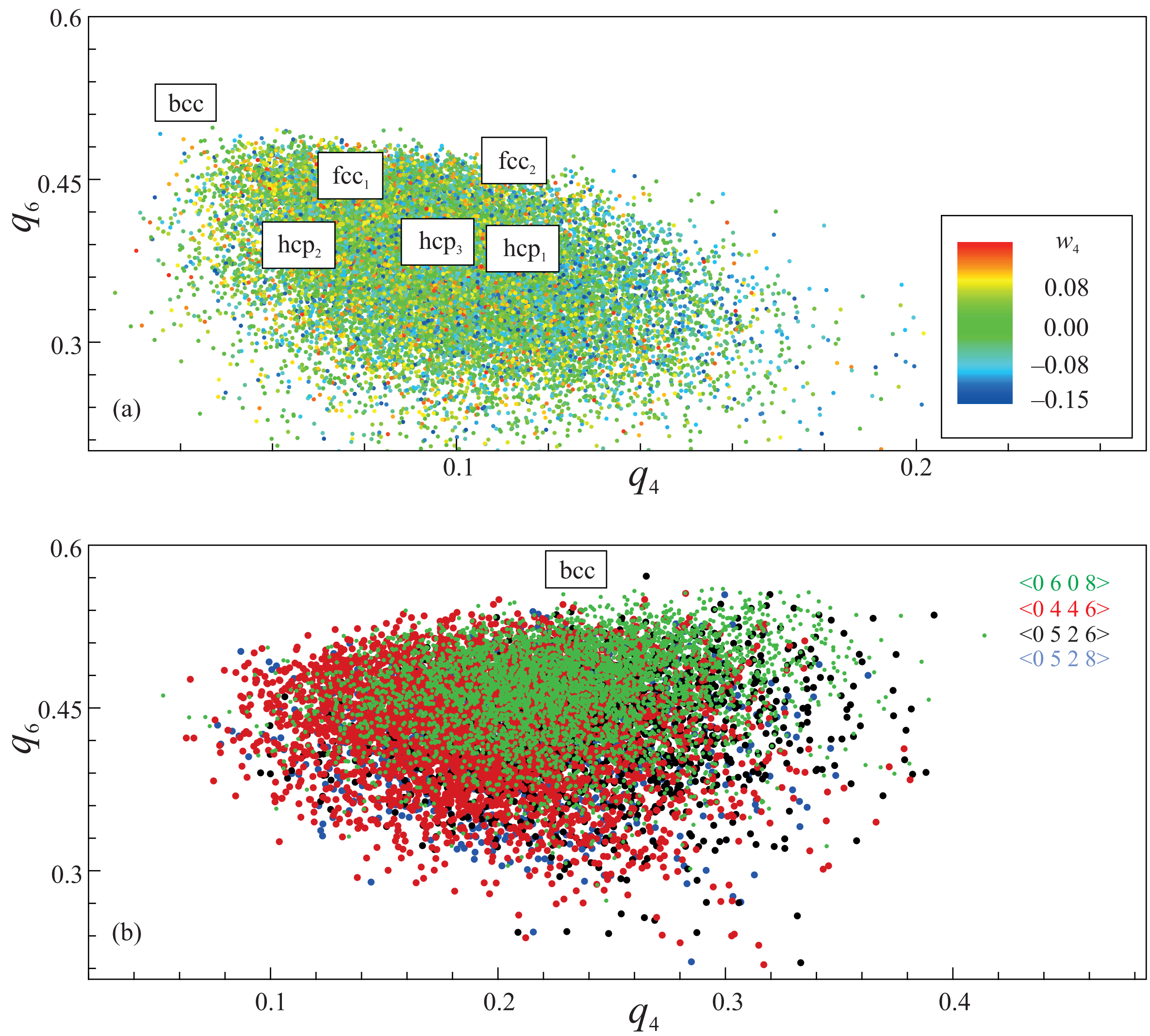

Рис. 2. (Цветной онлайн) Распределения $P_{2D}(q_i, q_j)$ на плоскости вращательных инвариантов q_4–q_6 для нагретой ОЦК (bcc) решетки. Панель (a) соответствует случаю, когда вращательные инварианты q_4 и q_6 вычислялись с фиксированным $n_{\rm nn} = 14$. Цвет частиц определяется значением вращательного инварианта w_4. На панели (b) использовались те же конфигурации, но инварианты вычислялись по ближайшим соседям, определяемым методом Вороного. Дополнительно, на верхней панели показаны значения q_4 и q_6 для идеальных решеток fcc и hcp, вычисленные по $n_{\rm nn} = 14$. Для fcc решетки это дает два набора инвариантов, а для hcp – три – они указаны на рисунке. Для нижней панели представлены данные для наиболее распространенных кластеров в такой системе (с индексами Вороного $\langle 0, 6, 0, 8\rangle$ (зеленый цвет), $\langle 0, 4, 4, 6\rangle$ (красный), $\langle 0, 5, 2, 6\rangle$ (черный) и $\langle 0, 5, 2, 8\rangle$ (синий цвет). Хорошо виден заметный и сопоставимый разброс у обоих распределений, что не дает возможности определить тип кристаллитов в рассмотренной системе указанными методами

личину q_{lm}). Такие значения q_l и w_l представлены в табл. 1 с индексом – Voronoi.

Как меняются распределения частиц по их значениям q_4 и q_6 при использовании данного подхода? На рисунке 2, в качестве примера, приведены двумерные распределения $P_{2D}(q_i, q_j)$ частиц на плоскости $(q_4$–$q_6)$ у нагретого bcc кристалла. Конфигурации атомов были получены при нагреве системы Юкавы с параметром экранировки $\kappa = 1$, кристаллическая фаза которой имеет тип симметрии bcc. Температура системы $T \simeq 0.3T_{\rm m}$, где $T_{\rm m}$ – температура плавления. На рисунке 2a используется стандартный подход, с фиксированным числом ближайших соседей: $n_{\rm nn} = 14$. Дополнительно к bcc, показаны значения q_4 и q_6 для идеальных решеток fcc и hcp, вычисленные по $n_{\rm nn} = 14$. Для fcc решетки это дает два набора инвариантов, а для hcp – три и они указаны на рис. 2. Видно, что все типы рассмотренных решеток присутствуют в показанном распределении и это не дает возможности, используя только эти данные, идентифицировать тип кристаллита в рассмотренной системе.

Рисунок 2b соответствует случаю, когда ближайшие соседи для каждого атома определялись методом Вороного, а q_{lm} вычислялись по формуле (4) с учетом площадей граней, соответствующих каждой соседней частице. Использовались те же конфигурации частиц, как и для рис. 2a. На рисунке 2b указанные распределения приведены для четырех наиболее распространенных в такой системе типов кластеров, топология которых характеризуется индексами Вороного: $\langle n_3, n_4, n_5, n_6\rangle$. Здесь n_i равно числу граней в многограннике Вороного с числом сторон 3, 4, 5 и 6 соответственно. Распределения для каждого топологического типа кластеров показаны разным цветом, который указан на рис. 2. Видно, что даже топологические кластеры с индексами такими же, как и для идеальной bcc решетки: $\langle 0, 6, 0, 8\rangle$, будучи искаженными в результате теплового движения атомов, дают сильный разброс в величинах q_4 и q_6. Для остальных кластеров разброс еще больше, что по-видимому делает данный метод не очень удобным для практического использования. В [35] в качестве примера работы указанного метода использовалась система твердых сфер при высоких плотностях упаковки $\phi_{\rm HS}$, выше предела Бернала ($\phi_{\rm HS} \geq 0.65$). Но в этом случае все кристаллиты (которыми являются кластеры fcc и hcp) легко определяются стандартным методом вращательных инвариантов с $n_{\rm nn} = 12$ [14, 15].

Выше были рассмотрены однокомпонентные ансамбли частиц, но если в рассматриваемой системе присутствуют атомы разного сорта, метод VT, вообще говоря, необходимо модифицировать с учетом размера частиц (в mVT). Это сильно усложняет метод [35]. В [37, 38] при моделировании методом EAM (Embedded Atom Method) затвердевания многокомпонентных расплавов NiZr и CuZrAl были использованы стандартный метод BOOP и оба метода Вороного VT и mVT. В частности, было показано, что при идентификации икосаэдрических (ico-like) кластеров оба подхода VT и mVT дают близкие результаты, но завышают их число по сравнению с BOOP. Это объясняется тем, что в методе VT такими кластерами считаются все частицы с индексом Вороного $\langle 0, 0, 12, 0\rangle$ (five-fold атомы) и среди них довольно много сильно искаженных ico-like кластеров, которые не проходят фильтр BOOP [39].

В настоящей работе предложен новый метод идентификации различных искаженных нанокристаллитов, включая трудно определяемые ОЦК-подобные (bcc-like) кластеры. Метод использует вращательные инварианты второго и третьего рода, определяемые с фиксированным числом ближайших соседей $n_{\rm nn} \equiv 12$. Использование распределений частиц по их значениям q_l и w_l в двумерных пространствах (q_4–q_6) и (w_4–w_6) позволяет надежно определить тип искаженной кристаллической решетки. Определение bcc-подобных кластеров основано на свойствах симметрии решетки bcc: использование 12 ближайших соседей при вычислении вращательных инвариантов вырождается только в два набора инвариантов (из возможных 15-ти комбинаций), которые заметно отличаются от плотно упакованных кластеров. При таком подходе дополнительно и сравнительно легко определяются и искаженные кластеры с плотной упаковкой (fcc-like, hcp-like, ico-like), что делает предлагаемый метод очень удобным при анализе ближнего и среднего ориентационного порядка у систем, где наблюдается сосуществование различных типов кристаллической решетки.

Работа выполнена при финансовой поддержке Министерства науки и высшего образования РФ (соглашение с ОИВТ РАН # 075-15-2020-785 от 23 сентября 2020 г.).

1. A. Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, and M. W. Chen, Science **341**, 376 (2013).
2. Y. Yang, J. Zhou, F. Zhu et al. (Collaboration), Nature **592**, 1 (2021).
3. S. Plimpton, J. Comput. Phys. **117**(1), 1 (1995).
4. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, J. Chem. Phys. **105**, 7641 (1996).
5. P. J. Steinhardt, D. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. Lett. **47**, 1297 (1981).
6. P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
7. A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **87**, 179 (1982).
8. A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **88**, 31 (1983).
9. P. R. ten Wolde, R. J. Ruiz-Montero, and D. Frenkel, J. Chem. Phys. **104**, 9932 (1996).
10. J. R. Errington and P. G. Debenedetti, J. Chem. Phys. **118**, 2256 (2003).
11. B. A. Klumov, JETP Lett. **98** 259 (2013).
12. S. Torquato, T. M. Truskett, and P. G. Debenedetti, Phys Rev. Lett. **84**, 2064 (2000).
13. Y. Jin and H. A. Makse, Physica A **98**, 5362 (2010).
14. B. A. Klumov, S. A. Khrapak, and G. E. Morfill, Phys. Rev. B **83**, 184105 (2011).

15. B. A. Klumov, Y. Jin, and H. A. Makse, J. Phys. Chem. B **118**, 10761 (2014).
16. A. Blaaderen and P. Wiltzius, Science **270**, 1177 (1995).
17. U. Gasser, E. R. Weeks, A. Schofield, P. N. Pusey, and D. A. Weitz, Science **292**, 5515 (2001).
18. O. A. Vasilyev, B. A. Klumov, and A. V. Tkachenko, Phys. Rev. E **88**(1), 012302 (2013).
19. G. E. Morfill, S. A. Khrapak, A. V. Ivlev, B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, and H. M. Thomas, Phys. Scr. **T107**, 59 (2004).
20. G. E. Morfill, A. V. Ivlev, S. A. Khrapak, B. A. Klumov, M. Rubin-Zuzic, U. Konopka, and H. M. Thomas, Contrib. Plasma Phys. **44**(5–6), 450 (2004).
21. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **53**, 1053 (2010) [Usp. Fiz. Nauk **180**, 1095 (2010)].
22. B. A. Klumov and G. Morfill, JETP Lett. **90**(6), 444 (2009).
23. D. I. Zhukhovitskii, V. N. Naumkin, A. I. Khusnulgatin, V. I. Molotkov, and A. M. Lipaev, JETP **130**, 616 (2020).
24. V. V. Reshetnyak, O. B. Reshetnyak, and A. V. Filippov, JETP **132**, 277 (2021).
25. A. Hirata, P. Guan, T. Fujita, Y. Hirotsu, A. Inoue, A. R. Yavari, T. Sakurai, and M. Chen, Nat. Mater. **10**, 28 (2010).
26. R. Xu, C. Chen, L. Wu, M. C. Scott, W. Theis, C. Ophus, M. Bartels, Y. Yang, H. Ramezani-Dakhel, M. R. Sawaya, H. Heinz, L. D. Marks, P. Ercius, and J. Miao, Nat. Mater. **14**, 1099 (2015).
27. Y. Yang, C. Chen, M. C. Scottet et al. (Collaboration), Nature **542**, 75 (2017).
28. R. E. Ryltsev, B. A. Klumov, N. M. Chtchelkatchev, and K. Yu. Shunyaev, J. Chem. Phys. **145**, 034506 (2016).
29. H. W. Sheng, W. K. Luo, F. M. Alamgir, J. M. Bai, E. Ma, Nature **439**, 419 (2006).
30. A. Baule, F. Morone, H. J. Herrmann, and H. A. Makse, Rev. Mod. Phys. **90**(1), 015006 (2018).
31. M. Hanifpour, N. Francois, S. M. V. Allaei, T. Senden, and M. Saadatfar, Phys. Rev. Lett. **113**, 148001 (2014).
32. Yu. Fomin, V. N. Ryzhov, B. A. Klumov, and E. N. Tsiok, J. Chem. Phys. **141**, 034508 (2014).
33. R. M. Khusnutdinoff and A. V. Mokshin, JETP Lett. **110**(8), 557 (2019).
34. R. Ryltsev, B. Klumov, and N. Chtchelkatchev, Soft Matter **11**(35), 6991 (2015).
35. W. Mickel, S. C. Kapfer, G. E. Schroder-Turk, and K. Mecke, J. Chem. Phys. **138**(4), 044501 (2013).
36. G. I. Voronoi, Reine Angew. Math. **134**, 198 (1908).
37. B. A. Klumov, R. E. Ryltsev, and N. M. Chtchelkatchev, J. Chem. Phys. **149**(13), 134501 (2018).
38. R. E. Ryltsev, B. A. Klumov, N. M. Chtchelkatchev, and K. Yu. Shunyaev, J. Chem. Phys. **149**(16), 164502 (2018).
39. B. A. Klumov, R. E. Ryltsev, and N. M. Chtchelkatchev, JETP Lett. **104**(8), 546 (2016).