

УДК 539.186.3+536.758

©1995

СТАТИСТИКА ФЛУКТУАЦИЙ КИНЕТИЧЕСКОЙ ЭНЕРГИИ АТОМОВ В ТВЕРДОМ ТЕЛЕ (компьютерный эксперимент)

А.И.Михайлин, Л.В.Жигилей, А.И.Слуцкер

Физико-технический институт им.А.Ф.Иоффе РАН, Санкт-Петербург
(Поступила в Редакцию 27 октября 1994 г.
В окончательной редакции 5 декабря 1994 г.)

Компьютерным моделированием (метод молекулярной динамики) исследованы флуктуации кинетической энергии (E_k) в ГЦК кристалле при постоянных температуре и давлении. Получено распределение мгновенных значений E_k и распределение флуктуаций E_k по их величине. Установлено соответствие этих распределений распределению Максвелла-Больцмана. Получена зависимость среднего времени ожидания флуктуации кинетической энергии атома от величины флуктуации.

Флуктуации энергии атомов лежат в основе термоактивационных процессов, таких как диффузия, испарение, пластическое и высокоэластическое деформирования, химические реакции, электронные переходы, биологическое функционирование и т.д. Продолжительность флуктуационного состояния атомов является малой (порядка периода атомных колебаний). Поэтому прямое экспериментальное исследование флуктуаций затруднено. Информация о флуктуациях носит косвенный характер и базируется главным образом на статистике вызываемых ими элементарных актов физических процессов. Детальную же информацию о самих флуктуациях энергии пока можно получить только методами компьютерного моделирования атомной динамики [1,2]. Так, в [3-8] на основе метода молекулярной динамики получен целый ряд детальных сведений о флуктуациях энергии атомов в одно-, двух- и трехмерных телах. Были получены и первые данные о статистике флуктуаций энергии атомов [3,6,8]. Следует отметить, что именно вопросы статистики флуктуаций особенно важны при анализе многочисленных термоактивационных процессов.

В настоящей работе с большей, чем ранее [3,6,8], статистической представительностью анализируются вопросы распределения энергии по атомам в кристаллической решетке. Такой анализ базируется на рассмотрении зависимости энергии атомов от времени, получаемой в ходе компьютерного моделирования. При этом в данной работе обсуждаются только флуктуации кинетической энергии атомов.

1. Методика компьютерного эксперимента

Метод молекулярной динамики заключается в численном интегрировании классических уравнений движения атомов с задаваемыми потенциалами межатомного взаимодействия при задаваемых начальных и граничных условиях.

В данной работе была выбрана модель трехмерного ГЦК кристалла, содержащего 864 атома. Использовался парный потенциал межатомного взаимодействия Стиллинджера-Вебера [9] с параметрами, отвечающими никелю. Для исключения влияния поверхностных эффектов на динамику атомов были заданы периодические граничные условия. Все расчеты основывались на алгоритме Андерсена-Нозе, позволяющем моделировать поведение системы при постоянных температуре и давлении, т.е. в условиях, существенно приближенных к реальным [10,11]. Проводимые расчеты соответствовали нулевому давлению. В начальный момент времени атомы находились в узлах кристаллической решетки и им были заданы импульсы, выбранные случайным образом. При этом суммарная энергия, розданная атомам, была такой, что отвечала температуре системы, равной 500 К (так, что среднее значение энергии атома составляло $3kT$, k — постоянная Больцмана).

Период колебаний атомов τ_0 вычислялся по коэффициенту линейной упругости в задаваемом потенциале и массе атомов. Для данного случая значение τ_0 соответствовало $1.02 \cdot 10^{-13}$ с.

Интегрирование уравнений движения атомов производилось с шагом интегрирования в $0.05\tau_0$.

В течение времени, равного 25 периодам атомных колебаний, проводилась термализация системы, после чего в течение $150\tau_0$ анализировали фазовую траекторию системы. В результате для каждого атома получали ряд мгновенных значений (через $0.05\tau_0$) его кинетической энергии

$$E_k(t) = \frac{1}{2} m \sum_q [\dot{x}_q(t)]^2,$$

где m — масса атома, $\dot{x}_q = \frac{dx_q}{dt}$ — составляющая скорости атома вдоль координаты $q = 1, 2, 3$.

Точность расчета контролировалась по сохранению в процессе счета интегралов движения.

Работоспособность модели в отношении соответствия ее динамическому поведению атомов в реальном твердом теле проверяли путем расчетов таких характеристик, как значения и температурные зависимости коэффициента термического расширения, модуля всестороннего сжатия и фактора Дебая-Валлера. По всем этим характеристикам получено вполне удовлетворительное согласие с экспериментальными данными для никеля [6].

2. Результаты компьютерного моделирования флуктуационной динамики атомов

На рис. 1 представлен фрагмент зависимости кинетической энергии одного из атомов модельного кристаллита от времени на протяжении около 20 периодов атомных колебаний. Кинетическая энергия (ϵ) отсчитывается в единицах $\frac{E_k}{kT}$. На этом рисунке среди большого числа мелких флуктуаций можно видеть одну достаточно мощную флуктуацию энергии $\epsilon \simeq 10$. Продолжительность этой флуктуации невелика — около одного периода атомных колебаний. Скоротечность флуктуаций энергии атомов характерна для твердотельных систем. Этот вопрос подробно рассмотрен в [8]. Из рис. 1 видно, что значения $\epsilon = 0$ относительно редки. Это представляется естественным для трехмерной системы. Для одномерной системы с одномерными колебаниями является неизбежным прохождение нулевого уровня кинетической энергии дважды за каждый период колебаний. В трехмерной системе совпадение фаз колебаний с разными поляризациями маловероятно, и поэтому нулевые значения кинетической энергии наблюдаются достаточно редко.

Временные развертки кинетической энергии для каждого атома в кристаллите, содержащем 864 атома на протяжении всех 150 периодов атомных колебаний в общем подобны рис. 1. Отличие состоит лишь в величине и числе наблюдающихся флуктуаций.

1) *Распределение мгновенных значений кинетической энергии атомов.* Распределение мгновенных значений кинетической энергии определялось через каждые полпериода атомных колебаний в течение 150 периодов. Результаты усреднялись по 300 наборам данных. В результате получали функцию интегрального распределения, т. е. доли числа атомов $\frac{n(\epsilon)}{n_0}$ ($n_0 = 864$), имеющих мгновенные значения энергии, превышающие последовательно задаваемые уровни $\epsilon = \frac{E_k}{kT}$. Значения ϵ задавались от $\epsilon = 0$ до 11.5 с шагом 0.5. Полученные результаты представлены на рис. 2, а. Дисперсия для большей части зависимости мала и возрастает несколько только для высоких значений ϵ .

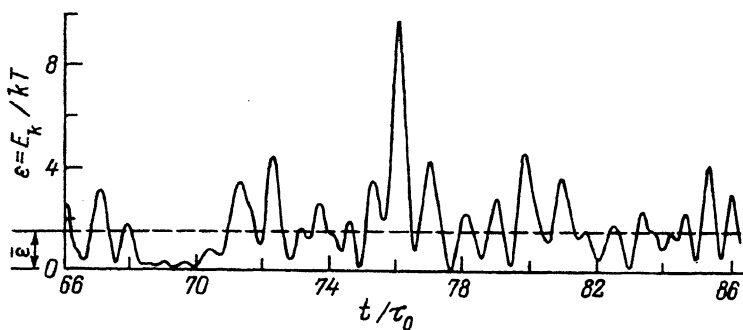


Рис. 1. Фрагмент тепловой жизни атома.

Трехмерная модель. 864 атома. Потенциал Стиллинджера-Вебера с параметрами для никеля. $\tau_0 = 1.02 \cdot 10^{-13}$ с — период колебаний атомов. $T = 500$ К. Участок с сильной флуктуацией кинетической энергии.

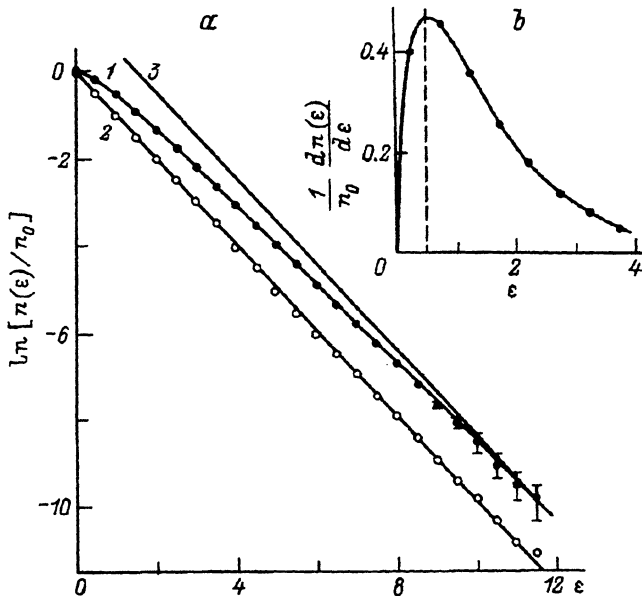


Рис. 2. Распределение мгновенных значений кинетической энергии атомов. а — интегральное распределение: 1 — непосредственное распределение значений кинетической энергии атомов, 2 — $F(\epsilon)$ — пересчет зависимости 1 по формуле (3), 3 — отвечает наклону зависимости, пропорциональной $\exp(-\epsilon)$. б — дифференциальное распределение.

Как видно из графика, зависимость $\ln \left[\frac{n(\epsilon)}{n_0} \right]$ обладает явной, хотя и несильной криволинейностью: в области небольших ϵ наклон меньше, а к высоким значениям ϵ наклон возрастает, приближаясь к значению -1 (наклон, равный -1 , отвечает фактору Больцмана). По интегральной зависимости $\frac{n(\epsilon)}{n_0}$ оценивали и дифференциальное распределение $\frac{1}{n_0} \frac{dn(\epsilon)}{d\epsilon}$, представленное на рис. 2, б. Видно, что функция дифференциального распределения является немонотонной и имеет максимум вблизи $\epsilon = 0.5$.

Основным вопросом при количественном анализе функции распределения является вопрос: отвечает ли полученная в компьютерном эксперименте зависимость теоретическому распределению, когда фундаментальные положения статистической физики о распределении подсистем по энергии применяются к системе из атомов, где каждый атом выступает как подсистема. Отметим, что правомочность такого распространения является не только неочевидной, но и, казалось бы, «противозаконной», поскольку отдельный атом в твердом теле не удовлетворяет термодинамическому понятию подсистемы.

В конденсированной системе выделяются распределения частиц отдельно по кинетической и по потенциальной энергии [12]. Вероятность частице иметь кинетическую энергию вблизи $\epsilon = \frac{E_k}{kT}$ дается выражением [12]

$$dW(\epsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \epsilon^{1/2} \exp(-\epsilon) d\epsilon. \quad (1)$$

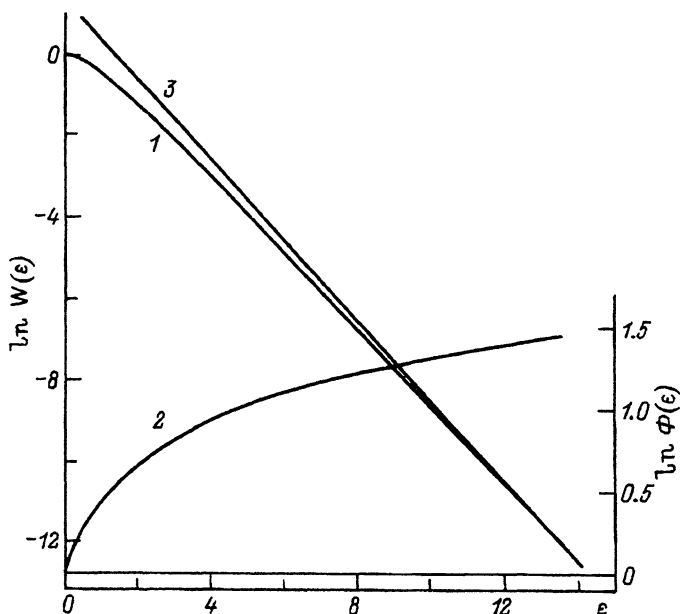


Рис. 3. Результаты численного интегрирования теоретической функции интегрального распределения кинетической энергии атомов. 1 — функция $W(\varepsilon)$, 2 — множитель $\Phi(\varepsilon)$, 3 — отвечает наклону зависимости, пропорциональной $\exp(-\varepsilon)$.

Тогда вероятность частице иметь кинетическую энергию, превышающую ε , равна

$$W(\varepsilon) = \int_{\varepsilon}^{\infty} dW(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\varepsilon}^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon. \quad (2)$$

Поскольку $\frac{n(\varepsilon)}{n_0} = W(\varepsilon)$, то именно эта функция и должна сопоставляться с результатами компьютерных экспериментов, представленных на рис. 2, а. Выражение (2) не интегрируется в элементарных функциях. Результат численного интегрирования приведен на рис. 3 (кривая 1). Эту функцию удобно представить в виде произведения

$$W(\varepsilon) = \frac{2}{\sqrt{\pi}} \int_{\varepsilon}^{\infty} \varepsilon^{1/2} \exp(-\varepsilon) d\varepsilon = \Phi(\varepsilon) \exp(-\varepsilon).$$

График функции $\Phi(\varepsilon)$ представлен на рис. 3 (кривая 2). Теперь можно проверить, отвечают ли компьютерные расчеты выражению (2). Видно, что зависимость $\ln \left[\frac{n(\varepsilon)}{n_0} \right]$ на рис. 2, а похожа по форме на зависимость $\ln W(\varepsilon)$ на рис. 3 (кривая 1).

Для количественной проверки перестроим данные рис. 2, а, используя $\Phi(\varepsilon)$. График результирующей функции

$$F(\varepsilon) = \ln \left[\frac{n(\varepsilon)}{n_0} \right] - \ln \Phi(\varepsilon) \quad (3)$$

представлен на рис. 2, а (зависимость 2). Можно видеть, что зависимость на всем протяжении является линейной, ее наклон равен -1 , экстраполяция графика к $\varepsilon = 0$ приводит к значению, равному нулю. Иными словами, соотношение (3) хорошо описывается функцией $\exp(-\varepsilon)$, а следовательно, $\frac{n(\varepsilon)}{n_0} = W(\varepsilon)$ выполняется.

Таким образом, полученное в компьютерном эксперименте распределение мгновенных значений кинетической энергии атомов хорошо совпадало с теоретическим распределением Максвелла-Больцмана. Это в свою очередь означает, что термодинамические ограничения в теории Гиббса не являются жесткими в отношении кинетической энергии атомов в конденсированной системе. Это давно известно для распределения кинетической энергии атомов в газе (формула Максвелла) и имеет прямое экспериментальное подтверждение. В отношении же конденсированных систем столь же прямых экспериментальных данных не получено, поэтому результаты компьютерных экспериментов могут иметь достаточно важное значение.

Установленное соответствие компьютерных данных теоретическому распределению (2) позволяет рассчитать энергию ε_m , отвечающую максимуму дифференциального распределения. Для функции (1) $\varepsilon_m = 0.5$. Как уже отмечалось, положение максимума распределения на рис. 2, b близко к $\varepsilon = 0.5$, что согласуется с теоретическим значением.

Это же соответствие позволяет определить такую важную характеристику как значение средней (по ансамблю) кинетической энергии атомов $\bar{\varepsilon}$. Для функции (1) $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2}$. Напомним, что в систему вводилась энергия из расчета средней полной энергии на атом, равной $3kT$. Уровень средней кинетической энергии $\bar{\varepsilon} = \frac{3}{2}$ показан на рис. 1.

2) *Распределение флуктуаций кинетической энергии атомов во времени.* Как уже отмечалось, этот вопрос является весьма важным при описании кинетики физических процессов. Речь идет о среднем времени ожидания флуктуации энергии атома в зависимости от величины флуктуации. В этом случае флуктуации рассматриваются как события, интервал между которыми описывается соответствующей временной функцией распределения. Изложенные выше данные о мгновенном распределении кинетической энергии атомов сами по себе не позволяют решить вопрос о временном распределении флуктуаций. Наряду с распределением мгновенных значений энергии, рассмотренным выше, для этого необходимы данные о продолжительности флуктуационных состояний. Эти данные можно получить из зависимости кинетической энергии атомов от времени, подобной той, что представлена на рис. 1.

С другой стороны, подсчет числа флуктуаций может быть сделан непосредственно в ходе компьютерного эксперимента. Проводя сравнение двух распределений, можно выяснить вопрос о самосогласованности модели.

Слово «флуктуация» происходит от латинского «fluctuatio» — колебание. В этом смысле любые значения энергии атома, изменяющиеся во времени, могут называться флуктуациями. Для дальнейшего же рассмотрения целесообразно называть флуктуациями экстремумы (пики или ямы) на зависимости энергии атомов от времени, подобной рис. 1. Тогда приобретает смысл и понятие продолжительности флук-

туационного состояния атома как ширины пика или ямы на той или иной высоте. При этом представляется также целесообразным вести отсчет энергии флуктуации от средней энергии. Тогда значения энергии ниже среднего выступают как отрицательные флуктуации, а выше среднего — как положительные. Разумеется, наибольший интерес вызывают мощные положительные флуктуации энергии. Именно за счет таких флуктуаций и осуществляются элементарные акты многих физических и химических процессов.

В компьютерном эксперименте проводится подсчет числа флуктуаций n_{fl} кинетической энергии атомов по отношению к среднему уровню кинетической энергии $\bar{E}_k = \frac{3}{2}kT$ за 150 периодов колебаний: для положительных флуктуаций — над задаваемыми уровнями энергии — $\varepsilon = \frac{E_k}{kT}$ от $\varepsilon = 3/2$ (среднее значение ε) до 10 с интервалом 0.5, для отрицательных флуктуаций — под задаваемыми уровнями энергии — от $\varepsilon = 3/2$ до 0 с таким же интервалом.

Подсчет числа флуктуаций проводился по числу двух последовательных пересечений кривой временной зависимости кинетической энергии атома заданного уровня энергии. При этом определялось и время пребывания атома над заданным уровнем энергии ($\delta t(\varepsilon)$). Наряду с таким методом проводился подсчет числа положительных флуктуаций «по горбам»: по числу локальных максимумов на зависимости кинетической энергии атома от времени. Для отрицательных флуктуаций соответственно рассматривались время пребывания ниже заданного уровня энергии и число локальных минимумов. Оба метода подсчета числа флуктуаций дали близкие результаты. Значения $\delta t(\varepsilon)$ усреднялись по всем атомам и всему времени счета.

Полученная функция интегрального распределения флуктуаций по их величине представлена на рис. 4. По оси абсцисс отложена величина отклонения кинетической энергии атома от среднего уровня $\Delta\varepsilon = \varepsilon - \bar{\varepsilon}$. Как видно из рис. 4, распределение отрицательных флуктуаций лежит в узком интервале от $\Delta\varepsilon = 0$ до $-3/2$ и имеет n -образную форму. Область значений положительных флуктуаций значительно шире. Здесь зависимость $\ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)]$ по форме похожа на зависимость для мгновенных значений $\ln\left[\frac{n(\varepsilon)}{n_0}\right]$ (рис. 2, а). Однако есть количественные отличия. Зависимость $\ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)]$ имеет бóльшую кривизну, чем зависимость $\ln\left[\frac{n(\varepsilon)}{n_0}\right]$, а наклон $\ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)]$ в области малых $\Delta\varepsilon$ сильнее отличается от -1 .

Как уже отмечалось, функции интегрального распределения для мгновенных значений и флуктуаций энергии связаны между собой и могут быть пересчитаны одни и другие, если известно время пребывания атома над задаваемыми уровнями энергии (или под уровнями для отрицательных флуктуаций), т. е. значения $\delta t(\Delta\varepsilon)$. Такие данные для положительных и отрицательных флуктуаций, полученные в компьютерном эксперименте, представлены на рис. 5. Видно, что зависимости являются монотонно спадающими. Для положительных флуктуаций наклон зависимости уменьшается с ростом $\Delta\varepsilon$.

Используем данные, представленные на рис. 5, чтобы сравнить две функции интегрального распределения $n(\varepsilon)$ и $n_{fl}(\Delta\varepsilon)$ для положитель-

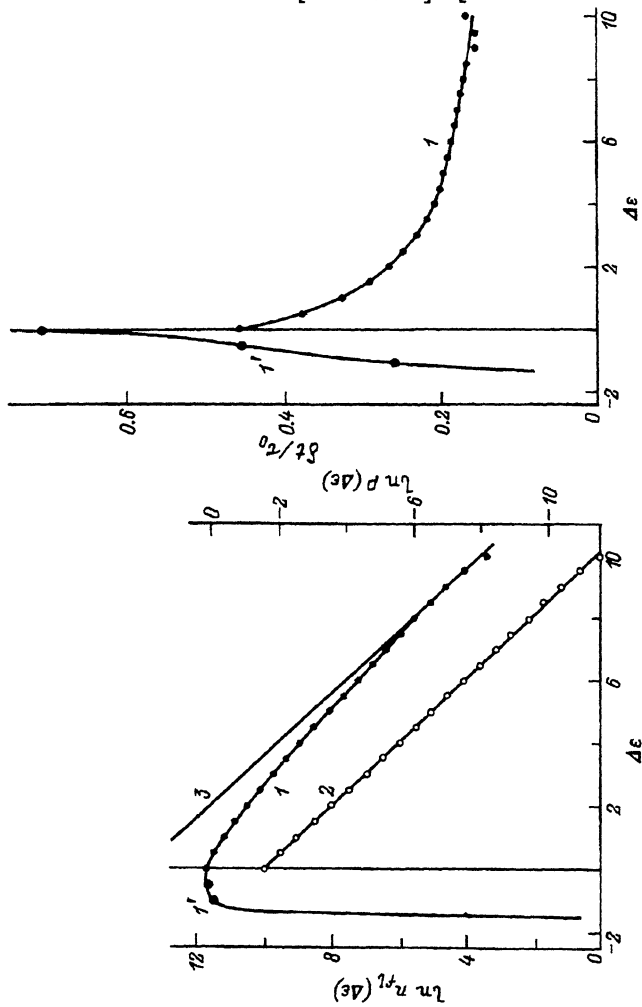


Рис. 4. Интегральное распределение флуктуаций кинетической энергии атомов.

Счет за 150 периодов колебаний. 1 — непосредственное распределение положительных флуктуаций кинетической энергии атомов, 1' — непосредственное распределение отрицательных флуктуаций кинетической энергии атомов, 2 — $P(\Delta\varepsilon)$ — пересчет зависимости 1 по формуле (4), 3 отвечает наклону зависимости, пропорциональной $\exp(-\varepsilon)$.

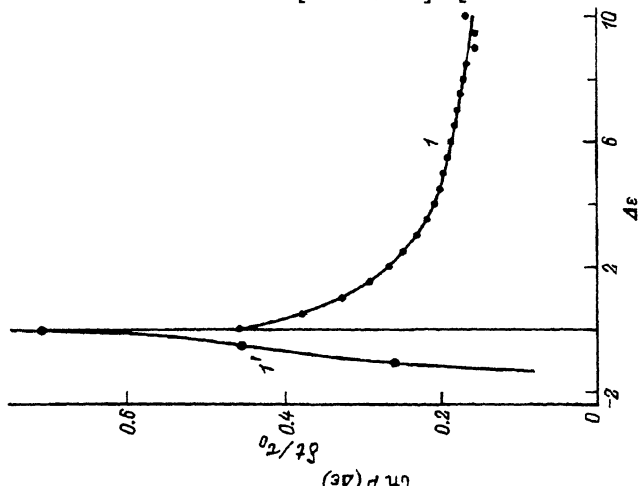


Рис. 5. Среднее время пребывания атома с кинетической энергией, отличающейся от средней.

1 — над задаваемыми уровнями энергии, 1' — под задаваемыми уровнями энергии.

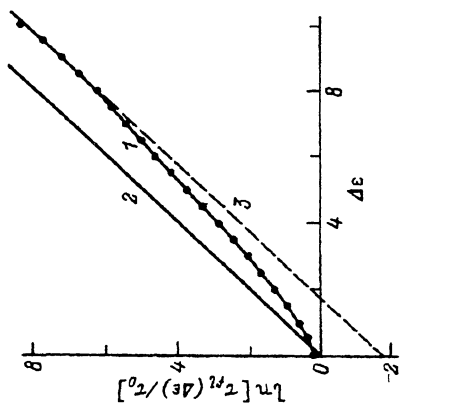


Рис. 6. Зависимость среднего времени ожидания положительных флуктуаций кинетической энергии атомов от величины флуктуации.

1 — по данным рис. 4 (зависимость 1), 2 — отвечает формуле Френкеля, 3 — линейная аппроксимация с единичным наклоном, дающая уточнение предельного множителя в формуле Френкеля.

ных флуктуаций. Как и раньше, вероятность атому иметь кинетическую энергию, превышающую уровень ε , равна

$$W(\varepsilon) = \Phi(\varepsilon) \exp(-\varepsilon) = \Phi(\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon) \exp(-\bar{\varepsilon}) \exp(-\Delta\varepsilon).$$

Тогда относительное время $\frac{t_{fl}}{t}$, в течение которого атом будет находиться в состоянии с повышенной кинетической энергией, большей $\varepsilon = \bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon$, составит

$$\frac{t_{fl}(\Delta\varepsilon)}{t} = W(\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon).$$

Пользуясь данными о среднем времени $\delta t(\Delta\varepsilon)$ пребывания атома в состоянии с энергией, большей $\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon$, можно записать

$$t_{fl}(\Delta\varepsilon) = \frac{\delta t(\Delta\varepsilon) n_{fl}(\Delta\varepsilon)}{n_0}.$$

Обозначим $t = N\tau_0$, где N — число периодов колебаний за время счета, в нашем случае $N = 150$, а число атомов в модельном кристаллите $n_0 = 864$. Тогда

$$\frac{\delta t(\Delta\varepsilon) n_{fl}(\Delta\varepsilon)}{\tau_0 N} = W(\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon) = \Phi(\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon) \exp(-\bar{\varepsilon}) \exp(-\Delta\varepsilon). \quad (4)$$

Отсюда результирующая функция

$$\ln P(\Delta\varepsilon) = \ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)] + \ln \frac{\delta t(\Delta\varepsilon)}{\tau_0} - \ln(Nn_0) - \ln \Phi(\bar{\varepsilon} + \Delta\varepsilon) + \frac{3}{2} = -\Delta\varepsilon. \quad (4a)$$

Построение зависимости $\ln P(\Delta\varepsilon)$ по данным рис. 3–5 для положительных флуктуаций приведено на рис. 4 (зависимость 3). Можно видеть, что: 1) зависимость на всем протяжении стала линейной, 2) наклон зависимости равен -1 , 3) экстраполяция графика к $\varepsilon = 0$ (или к $\Delta\varepsilon = -1.5$) приводит к значению, равному нулю.

Таким образом, действительно имеет место равенство $\ln P(\Delta\varepsilon) = -\Delta\varepsilon$, т.е. соотношение (4) выполняется. Это свидетельствует о согласованности полученных в ходе компьютерного эксперимента результатов.

Перейдем к вопросу о среднем времени ожидания флуктуаций кинетической энергии. Среднее время τ_{fl} ожидания флуктуации величиной $\Delta\varepsilon$ или более равно среднему времени между двумя такими флуктуациями энергии частицы, следующими друг за другом. Такое определение позволяет непосредственно использовать данные компьютерных экспериментов по числу флуктуаций для нахождения τ_{fl} .

Очевидно, что

$$\tau_{fl}(\Delta\varepsilon) = \frac{N\tau_0}{n_{fl}(\Delta\varepsilon)/n_0} = \tau_0 \frac{Nn_0}{n_{fl}(\Delta\varepsilon)}.$$

Отсюда

$$\ln \left[\frac{\tau_{fl}(\Delta\varepsilon)}{\tau_0} \right] = \ln(Nn_0) - \ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)]. \quad (5)$$

График такой зависимости, где использованы данные по $n_{fl}(\Delta\varepsilon)$ из рис. 4 (по положительным флуктуациям), приведен на рис. 6. Естественно, график для $\ln \tau_{fl}(\Delta\varepsilon)$ является зеркальным отображением графика для $\ln[n_{fl}(\Delta\varepsilon)]$ с сохранением его особенностей (нелинейности и отличия наклона от единицы).

В области высоких энергий ($\Delta\varepsilon \gtrsim 8$) наклон приближается к единичному, но в области средних и малых положительных флуктуаций отличие наклона от единицы становится заметным. Вид зависимости демонстрирует отличие от формулы Френкеля для среднего времени ожидания флуктуации энергии [13]

$$\ln \left[\frac{\tau_{fl}(\Delta\varepsilon)}{\tau_0} \right] = \Delta\varepsilon. \quad (6)$$

Можно сделать вывод о том, что формула Френкеля является, по-видимому, первым приближением, справедливым (по наклону зависимости (6)) в области достаточно больших флуктуаций. Но при этом, как видно из рис. 6, линейная экстраполяция зависимости $\ln \left[\frac{\tau_{fl}(\Delta\varepsilon)}{\tau_0} \right]$

к $\Delta\varepsilon = 0$ выводит на значение $\left. \frac{\tau_{fl}}{\tau_0} \right|_{\Delta\varepsilon=0} \simeq 0.2$, а не 1, как следует из формулы Френкеля.

Важность вопроса о виде зависимости $\tau_{fl} \left(\frac{\Delta E}{kT} \right)$ обусловлена тем, что на основе этой зависимости ведутся определения энергии активации самых разнообразных процессов. Уточнение вида этой зависимости может внести коррективы в определяемые энергии активации, а отсюда — и в выводы о деталях элементарных актов этих процессов.

В заключение следует подчеркнуть, что именно кинетическая энергия доминирует в мощных флуктуациях энергии атомов в твердых телах [8] и тем самым играет ведущую роль в кинетике процессов термоактивационной природы. В то же время, конечно, рассмотрение только флуктуаций кинетической энергии не исчерпывает вопросов флуктуационной динамики атомов. Следует рассмотреть и статистику флуктуаций потенциальной энергии, а затем и полной энергии атомов.

Список литературы

- [1] Ферми Э. Научные труды. М. (1972). Т. 2. С. 712.
- [2] Хеерман Д.В. Методы компьютерного эксперимента в теоретической физике. М. (1990). 175 с.
- [3] Ракитский Ю.В., Шукин Е.Д., Ющенко В.С., Сурис Ю.П., Цукерман И.А., Слущер А.И. ДАН СССР. **285**, 4, 941 (1985).
- [4] Михайлин А.И., Слущер И.А. ФТТ **31**, 2, 80 (1989).
- [5] Михайлин А.И., Слущер И.А. Письма в ЖТФ **16**, 1, 3 (1990).
- [6] Слущер И.А. Автореф. дисс. ЛГТУ. Л. (1990). 16 с.
- [7] Михайлин А.И., Слущер И.А. Изв. вузов. Физика, **5**, 47 (1991).
- [8] Слущер А.И., Михайлин А.И., Слущер И.А. УФН **164**, 4, 357 (1994).
- [9] Weber T.A., Stillinger F.H. Phys. Rev. **B31**, 4, 1954 (1989).
- [10] Andersen H.C. J. Chem. Phys. **72**, 4, 2384 (1980).
- [11] Nose S. J. Chem. Phys. **81**, 1, 511 (1984).
- [12] Ландау Л.Д., Лифшиц Е.М. Теоретическая физика. М. (1976). Т. 5. Ч. 1. 584 с.
- [13] Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. М. (1975). 594 с.