

ПОВЕДЕНИЕ СМЕСЕЙ АКТИВНЫХ И ПАССИВНЫХ НЕМАТИКОВ В ОГРАНИЧЕННОЙ ДВУМЕРНОЙ КРУГЛОЙ ОБЛАСТИ

*Л. В. Миранцев**

*Институт проблем машиноведения Российской академии наук (ИПМАШ РАН)
199178, Санкт-Петербург, Россия*

Поступила в редакцию 5 октября 2023 г.,
после переработки 17 января 2024 г.
Принята к публикации 18 января 2024 г.

С помощью простой молекулярной модели пассивных, активных нехиральных и хиральных нематиков проведено моделирование методами молекулярной динамики поведения их бинарных смесей в двумерной ограниченной области, имеющей форму круга. Изучены равновесные структуры в этих системах при нормальном и тангенциальном сцеплении частиц на границах. Показано, что в смесях, состоящих из пассивных и активных модельных частиц, а также в смесях активных частиц с различной хиральностью при достаточно больших самодвижущих силах содержащая их ограниченная область разбивается на кластеры, преимущественно состоящие из частиц одного вида. Для характеристики степени разделения смесей на эти кластеры вводится параметр их сегрегации. Вычисляются значения этого параметра при различных величинах самодвижущих сил и хиральности модельных частиц.

DOI: 10.31857/S0044451024050110

1. ВВЕДЕНИЕ

Активными системами называются естественные или искусственные системы, которые не находятся в состоянии термодинамического равновесия из-за энергии, передаваемой образующим их частицам либо извне, либо за счет внутренних химических процессов [1]. Примерами активных систем являются живые существа (птицы, рыбы, бактерии и пр.) Также активные системы могут быть созданы искусственным путем из объектов, использующих световую или химическую энергию. Важнейшей особенностью активных систем является существование в них коллективного движения, когда группы самодвижущихся частиц движутся как единое целое в масштабах, значительно превышающих размеры отдельных частиц. Изучение механизма и динамики таких коллективных движений имеет большую важность для исследования природных систем в широком интервале масштабов. Особый интерес представляют так называемые хиральные активные системы, состоящие из частиц с нарушенной зеркальной симметрией, и, особенно, хиральные актив-

ные нематики, обладающие дальним ориентационным порядком [2]. В настоящее время проводятся многочисленные экспериментальные и теоретические исследования хиральных активных нематиков в ограниченных пространствах с заданными граничными условиями на границах. Большинство теоретических исследований подобных систем [3–5] проводилось в рамках континуальных феноменологических моделей, использующих такие понятия, как тензор ориентационного порядка \mathbf{Q} и поле скоростей течения \mathbf{u} . В этих работах исследовались пространственно-временное поведение структуры поля директора \mathbf{n} и топологических дефектов активных нематиков в двумерных круглых областях при различных величинах радиуса R этих областей и различных граничных условиях. Также исследовалась зависимость поведения активных нематиков от такого феноменологического параметра, как величина активного напряжения α (active stress strength). Однако при рассмотрении поведения реальных активных систем, состоящих из микроскопических или наноскопических активных частиц (например, суспензий микротубул и моторных белков [1]), довольно сложно сопоставить феноменологический параметр α с характеристиками этих частиц. Пространственные ограничения являются важным фактором, определяющим различные свойства активных систем, на-

* E-mail: mlv@ipme.ru

пример, структуру течений в них и образование спиральных вихрей [3, 6–12]. Такие ограничения также могут быть использованы в практических приложениях, например, для управления живыми и искусственными самодвижущимися микроскопическими объектами [13–15].

Особый интерес представляет поведение активных систем, являющихся смесями различных активных частиц, заключенных в микроскопических областях с ограничивающими поверхностями [16]. Влияние ограничивающих поверхностей может привести к особому поведению таких смесей. В работе [16] исследовалось поведение бинарной смеси самодвижущихся и взаимодействующих друг с другом дисков с различными радиусами, заключенных внутри двумерной квадратной области. С помощью численного решения уравнений Ланжевена, описывающих движение этих дисков, были получены степень агрегации различных частиц у ограничивающих стенок, а также параметр их сегрегации. Очевидно, что подобная модель весьма далека от более или менее правдоподобной модели активных нематиков, состоящих из самодвижущихся частиц, имеющих продолговатую форму. С ее помощью также невозможно исследовать поведение ориентационного порядка в смесях таких частиц.

В работах [17, 18] нами была предложена довольно простая микроскопическая модель активных хиральных нематиков, и с помощью моделирования методами молекулярной динамики (MD) исследовалось их поведение в двумерных круглых и кольцеобразных ограниченных областях с различными граничными условиями. Было показано, что при не очень больших активных самодвижущих силах, действующих на частицы в таких системах, их структура и расположение в них топологических дефектов качественно совпадают с результатами упомянутых выше феноменологических моделей [3–5]. В связи с этим нами была использована эта же модель для MD-моделирования поведения бинарных смесей активных и пассивных нематиков, а также смесей активных нематиков с различной хиральностью в двумерной круглой области с ограничивающими поверхностями с нормальным и тангенциальным сцеплением частиц с ними. Была исследована зависимость этого поведения от геометрических и силовых характеристик модельных частиц.

2. МОДЕЛЬ

Для частиц активного нематика были использованы весьма простые модели, изображенные на рис. 1.

Изотропная часть взаимодействия между частицами рассматриваемого активного, а также пассивного нематика описывается с помощью короткодействующего парного потенциала Леннарда-Джонса (LJ)

$$U_{LJ}(r_{ij}) = 4\epsilon \left[\left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^{12} - \left(\frac{\sigma}{r_{ij}} \right)^6 \right], \quad (1)$$

который использовался в наших более ранних работах [19–21]. Здесь ϵ и σ — соответственно, энергетическая константа и характерная длина LJ-взаимодействия i -й и j -й частиц, r_{ij} — расстояние между ними. Анизотропная часть взаимодействия между этими частицами описывается следующим потенциалом типа Майера–Заупе:

$$U_{anis}(r_{ij}, \theta_{ij}) = -\epsilon_{anis} \left(\frac{3}{2} \cos^2 \theta_{ij} - \frac{1}{2} \right) \frac{\sigma^6}{r_{ij}^6}, \quad (2)$$

где ϵ_{anis} — энергетическая константа анизотропного взаимодействия, θ_{ij} — угол между длинными осями i -й и j -й частиц. Взаимодействие между частицами смеси и границами двумерной круглой области, в которую она помещена, также описывается потенциалами, аналогичными потенциалам (1) и (2), в которых константы взаимодействия ϵ , ϵ_{anis} и σ заменяются на константы взаимодействия ϵ_2 , ϵ_{anis2} и σ_2 . Кроме того, на каждую из активных частиц действует самодвижущая реактивная сила \mathbf{f}_0 , компоненты которой вдоль осей x и y равны

$$f_{0x} = f_0 e_x \cos \phi + f_0 e_y \sin \phi, \quad (3)$$

$$f_{0y} = f_0 e_y \cos \phi - f_0 e_x \sin \phi, \quad (4)$$

где \mathbf{e} — единичный вектор, направленный вдоль длинной оси частицы, ϕ — угол между \mathbf{e} и \mathbf{f}_0 . Кроме того, в случае хиральных частиц самодвижущая реактивная сила \mathbf{f}_0 создает действующий на частицу дополнительный вращающий момент $\tau_0 = f_0 \delta \sin \phi$ относительно ее центра масс. Для нехиральных частиц угол ϕ в формулах (3) и (4) необходимо положить равным нулю, а дополнительный вращающий момент просто отсутствует. Положение в пространстве и ориентация i -й частицы активного или пассивного нематика определялись путем численного решения следующих уравнений движения:

$$\frac{\partial^2 \mathbf{r}_i}{\partial t^2} = \frac{\mathbf{f}_i}{m}, \quad (5)$$

$$\frac{\partial \mathbf{e}_i}{\partial t} = \boldsymbol{\omega}_i \times \mathbf{e}_i, \quad (6)$$

$$\partial \boldsymbol{\omega}_i / \partial t = \boldsymbol{\tau}_i / I. \quad (7)$$

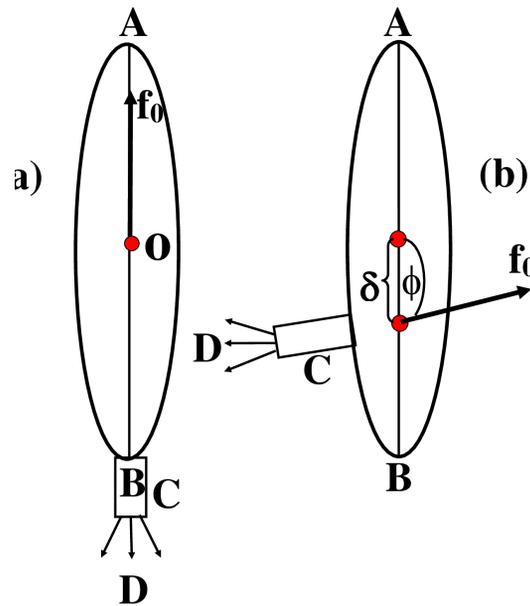


Рис. 1. Модели нехиральной (a) и хиральной (b) частиц активного нематика, используемые в нашем MD-моделировании: AB — длинная ось частиц; O — их центр массы; C — отросток, обеспечивающий способность частиц к самодвижению (боковой отросток обеспечивает ее хиральность); D — некая струя, которая выбрасывается из этого отростка и вследствие которой создается самодвижущая реактивная сила \mathbf{f}_0 (в случае хиральной частицы она приложена к точке O_1 и направлена под углом ϕ к длинной оси частицы); δ — расстояние между точкой приложения силы \mathbf{f}_0 и центром масс частицы

Здесь \mathbf{f}_i и $\boldsymbol{\tau}_i$ — полная сила и полный момент, действующие на i -ю частицу со стороны других частиц на ограничивающей поверхности, а также самодвижущие сила и момент; $\boldsymbol{\omega}_i$ — угловая скорость вращения вектора \mathbf{e}_i ; m и I — масса и момент инерции частицы соответственно. MD-моделирование проводилось на NVT -ансамблях, и на каждом временном шаге уравнения движения решались с помощью стандартного алгоритма [22], а приведенная температура системы T/ϵ поддерживалась постоянной и равной 0.9 с помощью термостата [22]. Для описания ориентационного порядка частиц внутри круглой области нами были введены радиальный Q_R и тангенциальный Q_T параметры порядка, которые определялись как

$$Q_R = \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{e}_i \cdot \hat{\mathbf{r}}_i|, \quad (8)$$

$$Q_T = \frac{1}{N} \sum_i |\mathbf{e}_i \cdot \mathbf{n}_i|, \quad (9)$$

где N — полное число частиц внутри круглой области, $\hat{\mathbf{r}}_i$ и \mathbf{n}_i — единичные векторы, параллельные и перпендикулярные радиус-вектору \mathbf{r}_i i -й частицы. Кроме того, для определения степени сегрегации частиц нематиков разного вида (активный нехиральный, активный хиральный, пассивный) нами вводился параметр сегрегации S , который определялся следующим образом. Двумерная область, со-

держащая смесь различных частиц, разбивалась на N_1 достаточно небольших подобластей и для каждой k -й области вычислялся параметр

$$S_k = |n_{k1} - n_{k2}| / (n_{k1} + n_{k2}), \quad (10)$$

где n_{k1} и n_{k2} — числа частиц соответственно первого и второго вида в этой k -й области. Тогда параметр сегрегации S для всей системы определяется как

$$S = \frac{1}{N_1} \sum_k S_k, \quad (11)$$

где суммирование ведется по всем N_1 подобластям.

3. РЕЗУЛЬТАТЫ MD-МОДЕЛИРОВАНИЯ И ИХ ОБСУЖДЕНИЕ

Нами было проведено MD-моделирование системы, состоящей из 1820 частиц, заключенных внутри двумерной круглой области радиусом 24σ . Из них половина частиц были частицами вида 1, а другая половина — частицами вида 2. Граничные условия в такой системе задавались с помощью «призрачных» (ghost) частиц, образующих слой толщиной 2σ на границе рассматриваемой круглой области. Эти частицы считались неподвижными и ориентированными так, что их единичные векторы \mathbf{e} были направлены вдоль радиуса, проведенного из центра круглой области в точку расположения данной призрачной частицы.

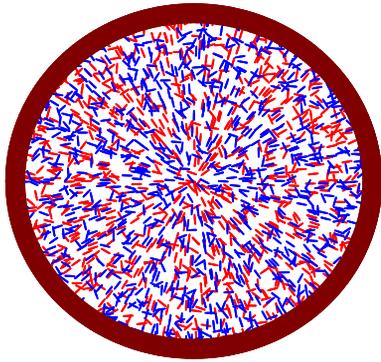


Рис. 2. (В цвете онлайн) Начальная конфигурация для MD-моделирования поведения бинарных смесей внутри двумерной круглой области. Красные и синие черточки — частицы вида 1 и 2 соответственно, коричневая кольцеобразная область содержит призрачные (ghost) частицы

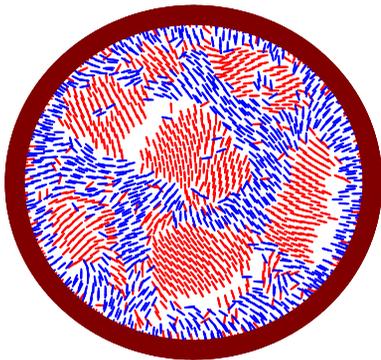


Рис. 3. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 10$, $\phi = \pi/2$ и 50% пассивных частиц с $f_0 = 0$, при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$ (значения приведены в безразмерных MD-единицах [22])

Мы рассматривали два типа граничных условий, соответствующих сильному тангенциальному и нормальному сцеплениям на ограничивающей поверхности. В первом случае призрачные частицы индуцируют ориентацию частиц нематика вдоль касательной к границе, а во втором случае — вдоль радиуса, проведенного в заданную точку. Для обеспечения сильного тангенциального сцепления константа взаимодействия ϵ_2 между частицами нематика и границей двумерной круглой области (т.е. призрачными частицами) считалась равной -5ϵ , а для сильного нормального сцепления мы брали $\epsilon_2 = 5\epsilon$. Мы также считали, что ϵ , σ_2 , m , I и δ просто равны единице в безразмерных MD-единицах [22]. Во всех случаях моделирование стартует из начальной конфигурации (рис. 2), в которой частицы хаотично располагались внутри круглой области и имели произвольные ориентации своих длинных осей.

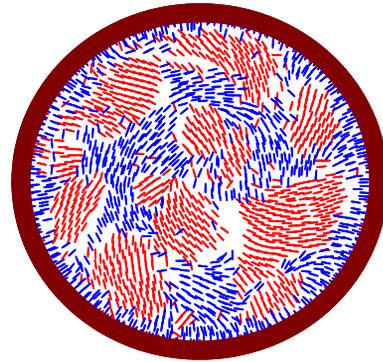


Рис. 4. (В цвете онлайн) Такая же конфигурация бинарной смеси, как и на рис. 3, но с $f_0 = 30$

Прежде всего нами было проведено MD-моделирование бинарной смеси, состоящей наполовину из активных частиц с отрезком C на рис. 1b, направленным под углом $\phi = \pi/2$ к длинной оси частицы, тогда как вторая половина смеси являлась обычным «пассивным» нематиком (сила $f_0 = 0$). На рис. 3 показана конфигурация такой смеси при $f_0 = 10$, при граничных условиях нормального сцепления и при $t = 100$. Видно, что смесь внутри круглой области состоит из небольших кластеров, содержащих в основном частицы либо первого, либо второго вида, однако границы между ними не четкие. Наличие небольших разреженных областей между некоторыми кластерами можно объяснить тем, что плотность частиц в кластерах немного больше средней плотности равномерно распределенных частиц в начальной конфигурации на рис. 2. Разделение на кластеры, состоящие из активных и пассивных частиц, становится более четким при увеличении самодвижущей силы f_0 . Это ясно видно на рис. 4, на котором показана конфигурация такой же смеси и при тех же граничных условиях, но при $f_0 = 30$.

На рис. 5 показаны временные зависимости параметров порядка Q_R и Q_T для упомянутой выше смеси, а рис. 6 показывает временную зависимость соответствующего параметра сегрегации S . На рис. 5 видно, что зависимости Q_R и Q_T стартуют из одного и того же значения $Q_R = Q_T = 0.5$, которое соответствует начальной конфигурации при $t = 0$, изображенной на рис. 2, в которой ориентации как активных, так и пассивных частиц распределены случайным образом. Дальнейший рост параметра Q_R и уменьшение параметра Q_T вызваны граничными условиями с нормальным сцеплением, что делает радиальный ориентационный порядок более предпочтительным.

При вычислении параметра сегрегации S мы разбили круглую область, содержащую нашу бинарную

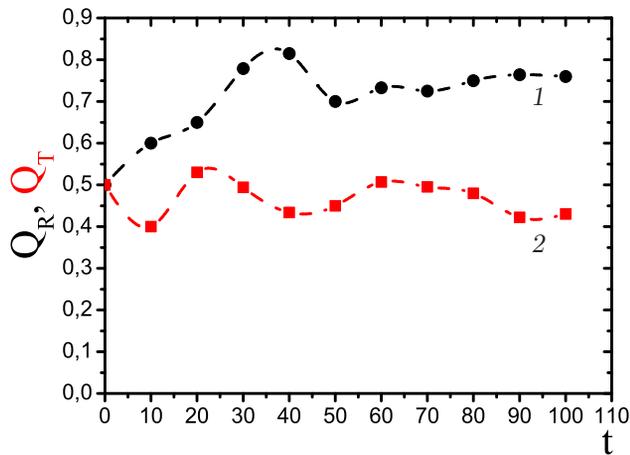


Рис. 5. Временные зависимости параметров Q_R (1) и Q_T (2), начиная с момента $t = 0$, который соответствует начальной конфигурации на рис. 2, и кончая моментом $t = 100$, соответствующим конфигурации на рис. 4

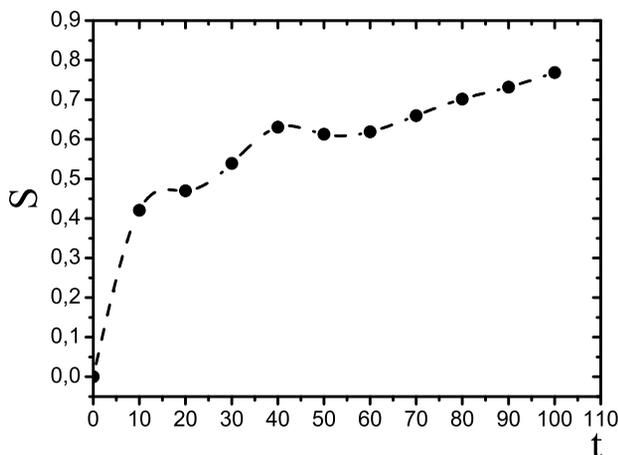


Рис. 6. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% пассивных частиц с $f_0 = 0$, при граничных условиях с нормальным сцеплением

смесь, на 10 колец равной толщины, а затем разбили каждое кольцо на 24 одинаковых сектора, получив, таким образом, 240 достаточно малых подобластей. После этого проводилась процедура определения параметра S , описанная в разд. 2. Ее результат, отраженный на рис. 6, говорит о постепенном росте параметра сегрегации от нуля, что соответствует начальной конфигурации со случайным распределением активных и пассивных частиц внутри круглой области, до довольно большой величины $S \approx 0.75$, соответствующей конфигурации с кластерами на рис. 4. При дальнейшем моделировании ($t > 100$) параметр сегрегации практически не растет, что говорит о достижении насыщения.

На рис. 7 показана конфигурация нашей смеси при $t = 100$ при граничных условиях с тангенци-

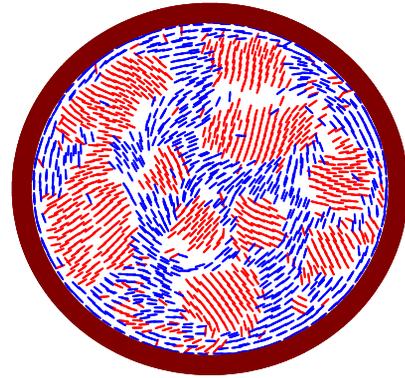


Рис. 7. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси при $t = 100$ при граничных условиях с тангенциальным сцеплением. $f_0 = 30$

альным сцеплением при $f_0 = 30$. Эта конфигурация также содержит кластеры активных и пассивных частиц, похожие на кластеры на рис. 4. Зависимость параметров порядка Q_R и Q_T при таких граничных условиях аналогична зависимости этих параметров на рис. 5, но на ней эти параметры как бы меняются местами, т. е. величина Q_T растет, а Q_R уменьшается. Это также вызвано граничными условиями с тангенциальным сцеплением, делающими тангенциальный ориентационный порядок более предпочтительным.

Что касается параметра сегрегации S , то его временная зависимость при тангенциальном сцеплении аналогична временной зависимости на рис. 6, а его величина при $t = 100$ тоже примерно равна 0.75. Эти результаты говорят о том, что при достаточно большой величине самодвижущей силы $f_0 = 30$ имеет место довольно четкое разделение бинарной смеси на кластеры активных и пассивных частиц, слабо зависящее от граничных условий.

Также было проведено MD-моделирование поведения бинарных смесей активных частиц с различной хиральностью при граничных условиях с нормальным и тангенциальным сцеплениями. В частности, на рис. 8 показана конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$ и $\phi = \pi/2$ и 50% пассивных частиц с $f_0 = 30$, но с отсутствием хиральности ($\phi = 0$), при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$. На рис. 8 видно, что эта бинарная смесь разбивается на два больших кластера, один из которых состоит из нормально ориентированных активных частиц с нулевой хиральностью и образует кольцеобразную область вблизи ограничивающей поверхности. Второй большой кластер состоит из активных частиц с углом $\phi = \pi/2$ и примыкает к правой половине клас-

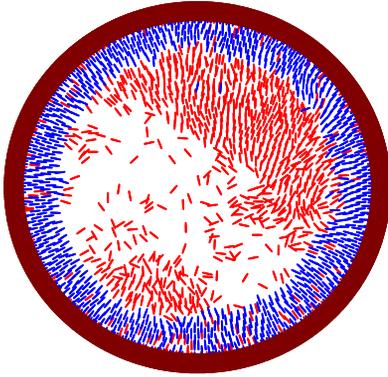


Рис. 8. (В цвете онлайн) Конфигурация бинарной смеси, содержащей 50% активных частиц с $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% активных частиц с $f_0 = 30$, но с отсутствием хиральности ($\phi = 0$) при граничных условиях с нормальным сцеплением при $t = 100$

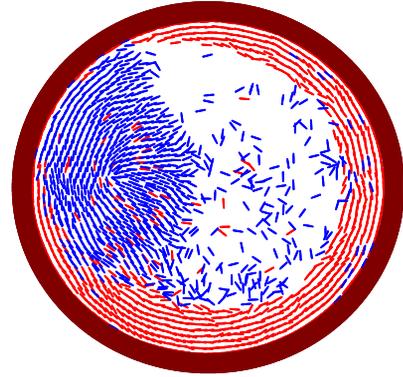


Рис. 10. (В цвете онлайн) Конфигурация такой же бинарной смеси, как и на рис. 8, но при граничных условиях с тангенциальным сцеплением $t = 100$

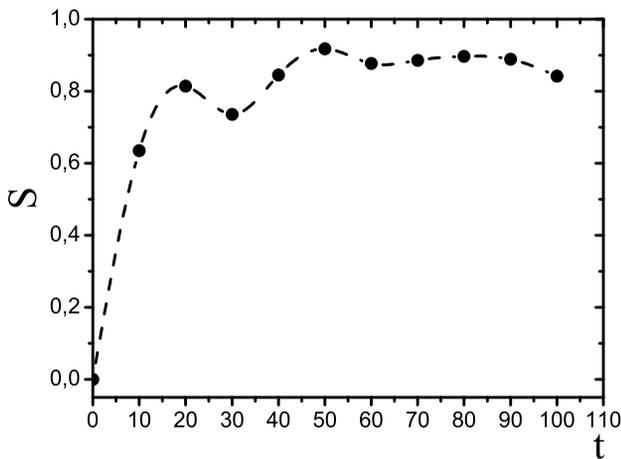


Рис. 9. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью (50% $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% $f_0 = 30$, $\phi = 0$) при граничных условиях с нормальным сцеплением

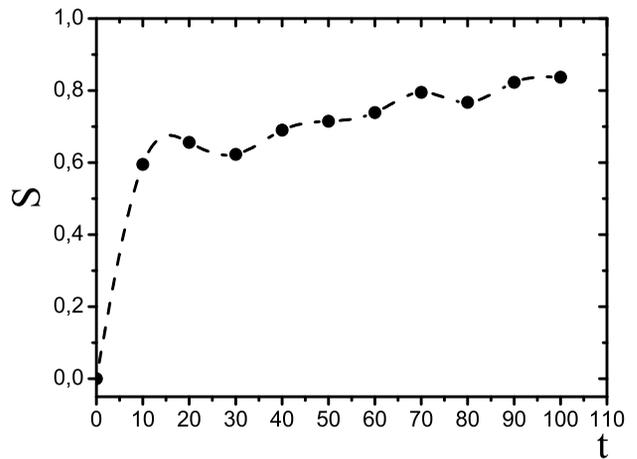


Рис. 11. Временная зависимость параметра S для бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью (50% $f_0 = 30$, $\phi = \pi/2$ и 50% $f_0 = 30$, $\phi = 0$) при граничных условиях с тангенциальным сцеплением

тера, состоящего из активных частиц с нулевой хиральностью. Также имеют место небольшой кластер активных хиральных частиц, примыкающий к левой половине кольцеобразного кластера активных нехиральных частиц, и разреженная область с активными хиральными частицами. Описанная выше процедура определения параметра сегрегации S дает его временную зависимость, представленную на рис. 9. Видно, что при $t = 0$ (начальная конфигурация на рис. 2) параметр S равен нулю, а при $t = 100$ (конфигурация на рис. 8) он достигает довольно большой величины $S \approx 0.9$.

На рис. 10 показана конфигурация аналогичной бинарной смеси, но при граничных условиях с тангенциальным сцеплением. Видно, что активные хиральные частицы ($\phi = \pi/2$) с тангенциальной ори-

ентациями в этом случае образуют кольцеобразный кластер вблизи ограничивающей поверхности, а активные нехиральные частицы ($\phi = 0$) образуют большой кластер, примыкающий к левой части этой кольцеобразной области, а также разреженную область с малой концентрацией частиц. Соответствующая временная зависимость параметра сегрегации приведена на рис. 11. Эта зависимость очень похожа на аналогичную зависимость на рис. 9 для случая такой же бинарной смеси при граничных условиях с нормальным сцеплением. Обе зависимости при $t = 100$ имеют значение параметра сегрегации $S = 0.8-0.9$. Это говорит о том, что в бинарной смеси активных частиц с различной хиральностью, заключенной внутри круглой области, также имеет место разделение на кластеры, состоящие из частиц одного вида, слабо зависящее от граничных условий.

4. ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Проведено MD-моделирование поведения бинарных смесей модельных активных и пассивных нематиков, а также активных нематиков с разной хиральностью внутри двумерной круглой области с ограничивающими поверхностями с нормальным и тангенциальным сцеплениями. Эти модельные активные материалы состоят из продолговатых частиц, которые взаимодействуют посредством изотропного потенциала Леннарда-Джонса и анизотропного потенциала типа Майера–Заупе. Такие продолговатые частицы также имеют придатки, испускающие струю некоторого вещества, созданную благодаря некоторой внутренней химической реакции. В случае нехиральных частиц эти придатки расположены на конце продолговатых частиц и направлены вдоль их длинных осей. У хиральных частиц придатки расположены сбоку и образуют некоторый угол ϕ с длинными осями. В результате в случае нехиральных частиц испускаемая струя создает дополнительную реактивную самодвижущую силу \mathbf{f}_0 , направленную вдоль длинных осей частиц, а на хиральные частицы действует не только реактивная самодвижущая сила, но и дополнительный момент $\boldsymbol{\tau}_0$, который вызывает самовращение частиц относительно их геометрических центров. Для пассивных нематиков самодвижущая сила \mathbf{f}_0 и дополнительный момент $\boldsymbol{\tau}_0$ равны нулю. Найдено, что бинарная смесь активных и пассивных нематиков, заключенная внутри круглой области, независимо от граничных условий разбивается на отдельные кластеры, состоящие в основном из частиц одного вида, причем, чем больше самодвижущая сила \mathbf{f}_0 , тем отчетливее выглядит такая кластерная структура. Такое же разбиение на кластеры имеет место в смесях активных нематиков с разной хиральностью. Для каждой бинарной смеси вычислен параметр сегрегации S для ее частиц и показано, что величина этого параметра может достигать довольно большого значения $S = 0.8\text{--}0.9$.

ЛИТЕРАТУРА

1. C. Bechinger, R. Di Leonardo, H. Lowen, C. Reichhardt, and G. Volpe, *Rev. Mod. Phys.* **88**, 045006 (2016).
2. A. Doostmohammadi, J. Ignes-Mullo, J. Yeomans, and F. Sagues, *Nat. Commun.* **9**, 3246 (2018).
3. M. Norton, A. Baskaran, A. Opathalage, B. Langeslay, S. Fraden, A. Baskaran, and F. Hagan, *Phys. Rev. E* **97**, 012702 (2018).
4. A. Maitra and M. Lenz, *Nat. Commun.* **10**, 920 (2019).
5. M. Norton, P. Grover, M. Hagan, and S. Fraden, *Phys. Rev. Lett.* **125**, 178005 (2020).
6. H. Wioland, F.G. Woodhouse, J. Dunkel, J. O. Kessler, and R. E. Goldstein, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 268102 (2013).
7. H. Wioland, E. Lushi, and R. E. Goldstein, *New J. Phys.* **18**, 075002 (2016).
8. M. Ravnik and J. M. Yeomans, *Phys. Rev. Lett.* **110**, 026001 (2013).
9. A. Doostmohammadi and J. M. Yeomans, *Eur. Phys. J. Spec. Top.* **227**, 2401 (2019).
10. S. Rana, M. Samsuzzaman, and A. Saha, *Soft Matter* **15**, 8865 (2019).
11. S. Das and R. Chelakkot, *Soft Matter* **16**, 7250 (2020).
12. S. Das, S. Ghosh, and R. Chelakkot, *Phys. Rev. E* **102**, 032619 (2020).
13. S. Das, A. Garg, A. I. Campbell, J. Howse, A. Sen, D. Velegol, R. Golestanian, and S. J. Ebbens, *Nat. Commun.* **6**, 8999 (2015).
14. T. Ostapenko, F. J. Schwarzendahl, T. J. Boddeker, C. T. Kreis, J. M. Cammann, G. Mazza, and O. Baumchen, *Phys. Rev. Lett.* **120**, 068002 (2018).
15. M. Popescu, S. Dietrich, and G. Oshanin, *J. Chem. Phys.* **130**, 94702 (2009).
16. X. Yang, M. L. Manning, and M. C. Marchetti, *Soft Matter* **10**, 6477 (2014).
17. L. V. Mirantsev, *Eur. Phys. J. E* **44**, 112 (2021).
18. E. J. L. de Oliveira, L. V. Mirantsev, M. L. Lyra, and I. N. de Oliveira, *J. Mol. Liq.* **377**, 121513 (2023).
19. A. K. Abramyan, N. M. Bessonov, L. V. Mirantsev, and N. A. Reinberg, *Phys. Lett. A* **379**, 1274 (2015).
20. A. K. Abramyan, N. M. Bessonov, L. V. Mirantsev, and A. A. Chevrychkina, *Eur. Phys. J. B* **91**, 48 (2018).
21. L. V. Mirantsev, *Phys. Rev. E* **100**, 023106 (2019).
22. M. P. Allen and J. Tildesly, *Computer Simulations of Liquids*, Clarendon Press, Oxford (1989).