

Об определении твердотельных кластеров в кристаллизующейся системе Юкавы

Б. А. Клумов¹⁾

Объединенный институт высоких температур РАН, 125412 Москва, Россия

Поступила в редакцию 3 июля 2024 г.

После переработки 17 июля 2024 г.

Принята к публикации 21 июля 2024 г.

На примере системы Юкавы рассматривается кристаллизация систем с мягким взаимодействием. Детально рассмотрен маршрут (pathway) кристаллизации на плоскости вращательных инвариантов q_4 и q_6 . Впервые для исследования кристаллизации применены недавно предложенные инварианты bcc_1 и bcc_2 , вычисленные с использованием 12-ти ближайших соседей. Показано, что объединение метода вращательных инвариантов и метода многогранников Вороного позволяет достаточно просто идентифицировать все типы твердотельных кластеров, образующихся при затвердевании системы, включая кластеры ОЦК, трудно определяемые обычными методами.

DOI: 10.31857/S0370274X24080182, EDN: KCGXHY

Понимание того, как кристаллизуются жидкости или расплавы вещества при их охлаждении — одна из важнейших проблем физики конденсированного состояния (например, [1]). Особенно важно уметь определять образующиеся в таких системах кристаллические кластеры, которые являются зародышами роста новой, твердотельной фазы. Для этого нужно знать координаты каждой частицы в пространстве. В контексте коллоидной [2] и комплексной плазмы [3] — это уже практически решенная задача, но и в реальных веществах за последнее время достигнут существенный прогресс. Начиная с работы [4] доступны методы экспериментального определения положений отдельных атомов в аморфных веществах (металлических стеклах). В [4] число наблюдаемых кластеров из атомов исчислялось десятками, в настоящее время уже возможно определить координаты нескольких десятков тысяч атомов [5], т.е. твердые аморфные вещества уже сегодня можно изучать на самом детальном уровне — на уровне поведения отдельных атомов. Значительный прогресс наблюдается и в вычислительном эксперименте, значение которого в изучении свойств конденсированного вещества неуклонно растет.

Особый интерес представляют свойства систем с дальнедействующим взаимодействием между частицами. К ним относятся кулоновские системы, системы мягких сфер и системы Юкавы с малых параметром экранировки. Такие системы, как правило, кристаллизуются с образованием ОЦК решетки (или

bcc, body centered cubic); такие кластеры, будучи часто сильно искаженными, довольно сложно идентифицировать из-за наличия близко лежащей второй координационной сферы (например, [6]).

Целью настоящей работы является исследование свойств кристаллических кластеров, образующихся при охлаждении жидкостных систем с мягким взаимодействием между атомами и определение структурных особенностей таких систем в области перехода жидкость–кристалл. В качестве примера подобной системы используется модельная система Юкавы.

Для получения трехмерных конфигураций атомов используется метод классической молекулярной динамики, реализованный для канонического ансамбля (NVT) с термостатом Нозе–Хувера (Nose–Hoover) и периодическими граничными условиями [7]. Типичное число частиц в исследуемом ансамбле $N \sim 10^5$. Взаимодействие между частицами описывается потенциалом Дебая–Хюккеля (Юкавы) ($U(r) = (Q/r) \exp(-r/\lambda)$, где Q — заряд частицы, а λ — длина экранирования). Вычисления проводились для разных значений параметра экранировки $\kappa = 0.5 \div 5$. Основные черты кристаллизации при таких значениях κ те же самые; поэтому для представления результатов был выбран случай $\kappa = 1$. Здесь $\kappa \equiv D/\lambda$, а D — среднее межчастичное расстояние в системе. В термодинамическом пределе твердотельной фазе таких систем соответствует bcc решетка [8].

Основное внимание в статье уделяется поиску ОЦК-подобных (bcc-like) кластеров. Идентификация таких кластеров часто бывает затруднена вследствие

¹⁾e-mail: klumov@ihed.ras.ru

теплового искажения, когда вторая координационная оболочка объединяется с первой. Такое искажение бсс решетки требует специальных методов для ее идентификации [9]. Напомним, что вторая оболочка у бсс кристалла состоит из 6 атомов (в первой находится 8 атомов) и она находится на расстоянии $\sqrt{4/3}D \simeq 1.15D$ от первой.

Для описания ближнего ориентационного порядка и определения типа различных кристаллических кластеров используются метод вращательных инвариантов (ВИ) [10–13] и метод многогранников Вороного (МВ) [14]. ВИ широко используются для количественного описания ближнего и среднего ориентационных порядков в самых разных системах, начиная от простых модельных систем (Леннарда–Джонса, Юкавы, твердых сфер) [15–19] до коллоидной и комплексной плазмы [20–22], металлических стекол [23–25], гранулированных сред [26–28] и др. МВ часто используется при исследовании свойств ближнего порядка в металлических стеклах [29–32].

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

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

где $Y_{lm}(\theta, \phi)$ – сферические гармоники, θ, ϕ – угловые координаты j -й частицы, определяемые вектором $\mathbf{r}_{ij}$. Для каждой частицы, используя $q_{lm}(i)$, можно вычислить вращательные инварианты второго $q_l(i)$ и третьего $w_l(i)$ рода:

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

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

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 $m_i = -l, \dots, l$, которые удовлетворяют условию: $(m_1 + m_2 + m_3) = 0$. Определенные таким образом вращательные инварианты и являются численной характеристикой ближнего ориентационного порядка. При таком определении каждый тип кристаллической решетки имеет свой уникальный набор ВИ q_l и w_l . Это дает возможность определить

наблюдаемую в эксперименте или численном моделировании упорядоченную структуру, сравнивая наблюдаемые значения q_l, w_l с величинами ВИ идеальных решеток. Если изучаются системы с плотной упаковкой, то удобно выбирать фиксированное для всех частиц $NN = 12$, при этом на распределениях атомов по различным инвариантам $P(q_i, w_i)$ легко увидеть кластеры fcc-like, hcp-like и икосаэдрическую фазу (ico-like). Важно отметить, что NN является параметром и меняется в зависимости от изучаемой системы. В качестве NN удобно использовать среднее число частиц в первой координационной сфере. В таблице 1 приведены ВИ для ряда совершенных кристаллических кластеров с разным числом ближайших соседей NN . Часто для количественного описания ближнего порядка используют величину q_6 . Для полностью неупорядоченной системы (газ частиц) среднее значение $q_6 \simeq 0.29$ (при $NN = 12$), а значение q_6 у твердотельных кластеров значительно выше. Максимальная величина $q_6 \simeq 0.66$ у икосаэдра, который является важным структурным элементом переохлажденных жидкостей и стекол (например, [29]). Важное свойство инварианта q_6 заключается в том, что любое искажение решетки приводит к его уменьшению.

В [9] было показано, что у идеальной бсс решетки для $NN = 12$ существует только два набора инвариантов (в которые вырождаются 15 возможных комбинаций положений 6-ти атомов второй координационной сферы). Они указаны в табл. 1 как бсс₁ и бсс₂. Инварианты бсс₁ присутствует только в 3 из 15 комбинаций – им соответствуют конфигурации атомов из 12 частиц, в которой отсутствуют две частицы из второй оболочки, расположенные друг напротив друга. Вращательные инварианты с бсс₂ – присутствует же в 12 комбинациях. Таким образом, вычисляя ВИ с фиксированным $NN = 12$, определяют не только все атомы с плотной упаковкой (fcc-like, hcp-like), ico-like, но и бсс-like частицы. Это является сильным упрощением поиска твердотельных кластеров по сравнению с другими методами. Добавим, что используя $NN = 8$ очень трудно различить бсс-like и fcc-like кластеры, а с $NN = 14$ даже слабые искажения бсс решетки приводят к сильному разбросу значений ВИ, что затрудняет поиск бсс-like частиц.

При моделировании сначала была подготовлена равновесная жидкость Юкавы с плотностью $\rho^* = 1$ и температурой $T^* = 3$ (в редуцированных единицах LJ), затем система охлаждалась до $T^* = 1.5$ с темпом 3×10^{-4} (вариант Q_1) и 1.5×10^{-4} (вариант Q_2), так что $Q_1/Q_2 = 2$. Это потребовало примерно $\sim 10^7$ временных шагов δt^* ($\delta t^* = 10^{-3}$) на каждый рас-

Таблица 1. Вращательные инварианты q_l и w_l ($l = 4, 6$) ряда идеальных кристаллических структур, вычисленные для фиксированного числа ближайших соседей (NN, Nearest Neighbors), 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), икосаздрическая (ico), объемноцентрированная кубическая (ОЦК, bcc), простая кубическая (ПК, sc) и алмазоподобная (dia)

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
Икосаздрическая (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 (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
ПК (sc) (NN = 6)	0.76	0.35	0.159	0.013
Алмазная (dia) (NN = 4)	0.51	0.628	−0.159	0.013

чет. При температуре $T_c^* \simeq 1.7$ в обоих случаях наблюдался переход кристалл–жидкость со значением параметра неидеальности $\Gamma \equiv E_p/E_k \simeq 650$, где E_p и E_k – потенциальная и кинетическая энергии системы. Напомним, что фазовое состояние системы Юкавы полностью определяется двумя параметрами κ и Γ . Для полученных конфигураций атомов были вычислены различные структурные индикаторы, такие как парная корреляционная функция и ее производные, вращательные инварианты, многогранники Вороного, которые будут обсуждаться ниже.

На рисунке 1 показан ряд характеристик кристаллизующейся системы Юкавы. Показана температурная зависимость потенциальной энергии системы U_p для двух темпов охлаждения Q_1 (красная кривая) и Q_2 (зеленая кривая) ($Q_1/Q_2 = 2$). Хорошо видно резкое падение U_p в узком диапазоне температур, что соответствует переходу жидкость–кристалл. Видно, что этот переход зависит от темпа охлаждения. В случае более быстрого охлаждения (Q_1) область перехода значительно шире. Вставки на рис. 1 показывают поведение при разных температурах парной корреляционной функции (ПКФ) $g(r)$ при кристаллизации (вставка (a)) и ассоциированных с ней структурных индикаторов $g_{\max}$ и $g_{\min}$ (вставка (b)). Вместе с функцией $g(r)$ на вставке (a) также показана соответствующая кумулятивная ПКФ $N(< r)$, определяемая из:

$$N(< r) \equiv \int_0^r 4\pi r^2 g(r) dr. \quad (4)$$

Функция $N(< r)$ определяет среднее число частиц в сфере радиусом r . Цвет кривых на вставке (a) определяется температурой и меняется от красного к синему при ее уменьшении. Хорошо видно, что в твердотельной фазе среднее координационное число (т.е.

значение $N(< r)$ при первом ненулевом минимуме $g(r)$) $CN \simeq 14$, что говорит в пользу образования bcc-like кластеров в системе. Об этом же говорит и вид функции $g(r)$ в этой фазе: ее первый пик сильно асимметричен, что объясняется объединением двух первых координационных сфер в bcc-like кластерах. На вставке (b) показано, как в области перехода ведут себя простые структурные индикаторы: первый пик ПКФ $g_{\max}$ (сплошные линии) и первый ненулевой минимум ПКФ $g_{\min}$ (пунктирные линии) для двух темпов охлаждения Q_1 (красные кривые) и Q_2 (зеленые кривые). Оба индикатора резко меняются в области фазового перехода, что делает их простыми и удобными параметрами, характеризующими процесс кристаллизации. Ранее они применялись для описания плавления [6].

Для определения же различных типов кристаллитов необходимо определить ближний ориентационный порядок у каждого атома. Такие данные приведены на рис. 2, где показана плотность распределения вращательных инвариантов частиц системы Юкавы на плоскости инвариантов q_4 – q_6 на разных стадиях кристаллизации. Подобное представление успешно использовалось для описания плазменных кристаллов, наблюдаемых на борту МКС [33] и для идентификации кластеров в стекольной фазе [4, 5].

Панели (a), (b), (c), (d) рис. 2 характеризуют жидкость вблизи перехода (a), начальную стадию кристаллизации (b), образование крупных bcc-like кластеров (c) и практически полную кристаллизацию системы (d). Такое описание демонстрирует маршрут (pathway) от жидкости к кристаллу и то, как в такой системе и из каких частиц появляются кристаллиты bcc. Все инварианты вычислялись с фиксированным числом ближайших соседей (NN = 12). Для

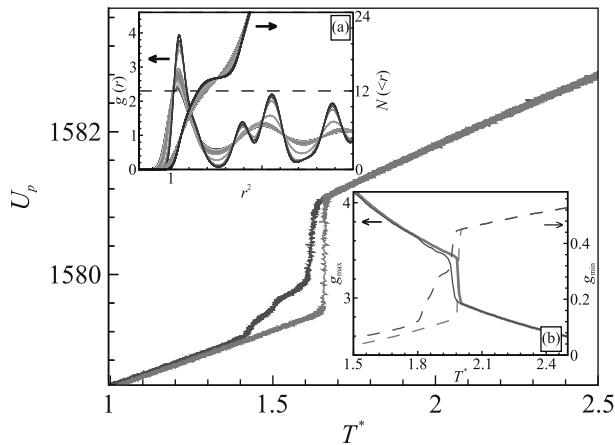


Рис. 1. (Цветной онлайн) Кристаллизация системы Юкавы. Показана потенциальная энергия системы U_p в зависимости от приведенной температуры T^* для двух темпов охлаждения Q_1 (красная кривая) и Q_2 (зеленая кривая), причем $Q_1/Q_2 = 2$. Хорошо видно резкое падение U_p в узком диапазоне температур, что соответствует переходу жидкость–кристалл. Видно, что этот переход зависит от темпа охлаждения. На вставке (а) показаны парные корреляционные функции (ПКФ) $g(r)$ и кумулятивные ПКФ $N(<r)$ (функция $N(<r) \equiv \int_0^r 4\pi r'^2 g(r') dr'$ и определяет среднее число частиц в сфере радиусом r). Цвет кривых зависит от температуры и меняется от красного к синему при ее уменьшении. Видно, что в твердотельной фазе среднее координационное число (т.е. значение $N(<r)$ при первом ненулевом минимуме функции $g(r)$) $CN \simeq 14$, что говорит в пользу образования bcc-like кластеров в системе. Об этом же говорит и вид функции $g(r)$ в этой фазе: ее первый пик сильно асимметричен, что отражает объединение двух первых координационных сфер. На вставке (b) показана температурная зависимость структурных индикаторов, ассоциированных с функцией $g(r)$. Представлены параметры: первый пик ПКФ $g_{\max}$ (сплошные линии) и первый ненулевой минимум ПКФ $g_{\min}$ (пунктирные линии) для двух темпов охлаждения Q_1 (красные кривые) и Q_2 (зеленые кривые) в зависимости от T^* . Хорошо видна область фазового перехода для обоих случаев. Параметр экранировки $\kappa = 1$. Число частиц в системе $N \simeq 10^5$

сравнения на каждом графике приведены соответствующие инварианты идеальных кристаллических кластеров (ico/fcc/hcp/bcc) (см. табл. 1.).

На стадии образования крупных кластеров (с) и (d) (рис. 2) видно формирование максимумов плотности указанного распределения вблизи значений инвариантов bcc₁ и bcc₂ при практически полном отсутствии частиц с fcc типом симметрии. На панели (d) на вставке (рис. 2) для сравнения показано характерное распределение инвариантов для кристаллизующейся системы LJ (как пример системы с жестким

взаимодействием между атомами и которая кристаллизуется в fcc фазу). Видно, что в системе LJ доминируют fcc-like и hcp-like кластеры при полном отсутствии bcc-like фазы.

Соответствующее пространственное распределение bcc-like частиц показано под каждым распределением частиц на плоскости ВИ. Видно, что ВИ дают прекрасную возможность идентифицировать каждый bcc-like атом, находящийся в системе. Нижняя панель демонстрирует одномерные распределения $P(q_4)$ и $P(q_6)$ для рассмотренных конфигураций. Такие распределения удобны для качественного анализа ближнего ориентационного порядка и определения возможных типов симметрии у образующихся кристаллитов. Видно также заметное количество hcp-like частиц в системе на всех рассмотренных стадиях, однако можно показать, что в отличие от bcc-like кластеров, которые растут в размере в процессе кристаллизации, hcp-like кластеры практически не объединяются друг с другом и остаются на стадии почти полной кристаллизации точечными дефектами.

Для определения bcc-like и ico-like частиц дополнительно к вращательным инвариантам крайне полезно использовать также и метод многогранников Вороного [34]. Напомним, что для идентификации fcc-like и hcp-like частиц метод МВ непригоден (например, [6]) из-за неустойчивости разбиения Вороного для таких кристаллитов по отношению к слабым смещениям атомов. В МВ топология кластеров характеризуется индексами Вороного $\langle n_3, n_4, n_5, n_6 \rangle$, где n_i равно числу граней в многограннике Вороного с числом сторон 3, 4, 5 и 6 соответственно. Идеальные кластеры bcc и ico характеризуются индексами $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$ (для bcc) и $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ (для ико-саэдра). На рисунке 3. представлена концентрация таких кластеров при кристаллизации системы Юкавы. Дополнительно показано поведение доминирующего в жидкой фазе кластера с топологией $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$. Видно, что кристаллизация системы сопровождается резким ростом концентрации bcc-like кластеров и резким падением доли ico-like частиц; ее можно использовать как один из индикаторов кристаллизации в системе. Также при кристаллизации наблюдается рост концентрации кластеров $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$, которые, вероятно, связаны с образованием bcc фазы, но в отличие от bcc-like кластеров не объединяются в крупные агломераты, а остаются в области перехода точечными кластерами. Среди кластеров $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$ довольно значительна доля сильно искаженных кластеров, которые на плоскости ВИ находятся вдали от идеальных кристаллитов. Это означает, что объ-

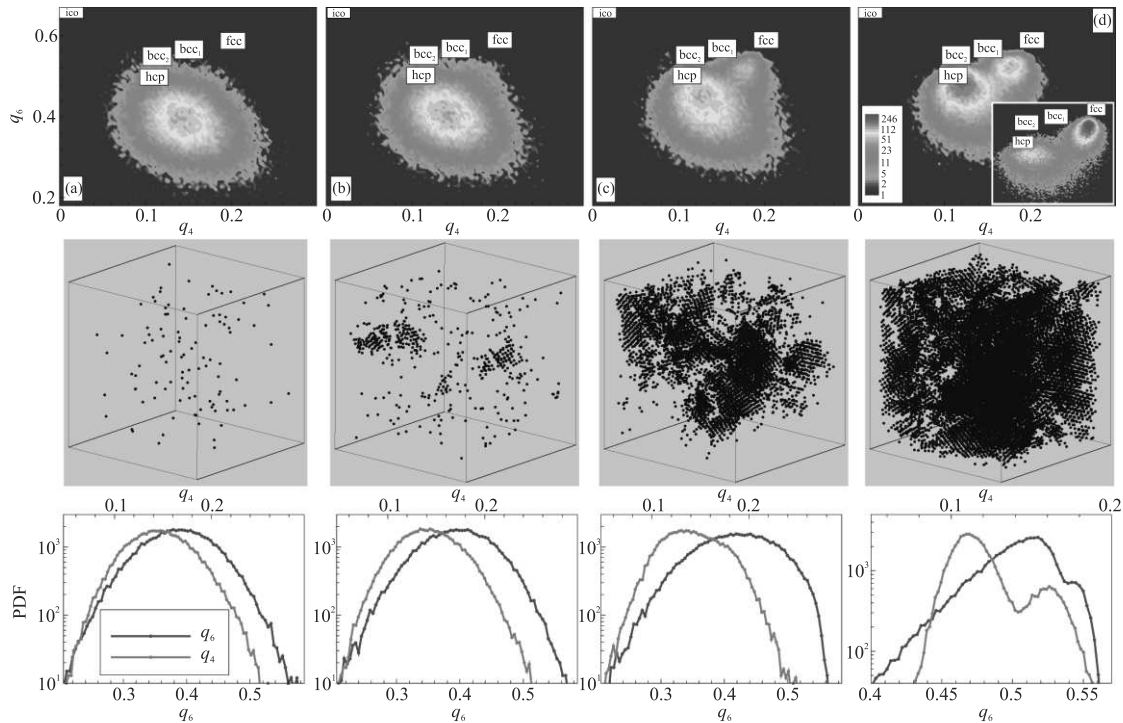


Рис. 2. (Цветной онлайн) Кристаллизация системы Юкавы. Верхняя панель показывает плотность распределения вращательных инвариантов частиц на плоскости q_4 – q_6 при разных температурах T^* , демонстрируя маршрут (pathway) кристаллизации и то, как в такой системе появляются кристаллические кластеры. Для сравнения показаны инварианты идеальных решеток (см. табл. 1). Инварианты вычислялись с фиксированным числом ближайших соседей ($NN = 12$). Панели (a), (b), (c), (d) характеризуют жидкость вблизи перехода (a), начальную стадию кристаллизации (b), образование крупных bcc-like кластеров (c) и практически полную кристаллизацию системы (d). На панели (d) на вставке для сравнения показано характерное распределение инвариантов для кристаллизующейся системы LJ, где доминируют fcc-like и hcp-like кластеры при полном отсутствии bcc-like фазы. Под указанными распределениями представлены соответствующие пространственные распределения bcc-like частиц. Нижняя панель демонстрирует одномерные распределения $P(q_4)$ и $P(q_6)$ для данных конфигураций. Видно заметное количество hcp-like кластеров в системе, а также отсутствие fcc-like кластеров на всех рассмотренных стадиях кристаллизации. В жидкой фазе присутствует небольшая доля икосаэдрической фазы, которая исчезает при кристаллизации

единение метода инвариантов и Вороного наиболее продуктивный путь поиска кристаллических кластеров в системах с мягким взаимодействием, которые кристаллизуются с образованием ОЦК фазы. МВ определяет ico-like и bcc-like кластеры, а использование метода инвариантов оставляет из них только слабо искаженные кристаллиты и дополнительно определяет все твердотельные кластеры с плотной упаковкой.

В настоящей работе на примере кристаллизующейся системы Юкавы с малым параметром экранировки определен маршрут частиц (pathway) при переходе жидкость–кристалл на плоскости вращательных инвариантов q_4 – q_6 и показано, как можно относительно просто определять образующиеся в такой системе твердотельные кластеры. Впервые показано, что наиболее эффективно определять bcc-like атомы с помощью вращательных инвариантов bcc_1

и bcc_2 . Помимо этого ВИ, вычисляемые с фиксированным числом ближайших соседей ($NN = 12$) позволяет дополнительно идентифицировать наиболее распространенные типы кристаллических кластеров, которые встречаются в плотных системах с мягким и жестким взаимодействием (такие как, например, fcc-like, hcp-like, bcc-like, ico-like атомы и др). При определении bcc-like частиц объединение метода ВИ с методом Вороного, позволяет удалять из рассмотрения сильно искаженные bcc-like кластеры $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$ и тем самым аккуратно вычислять кристаллиты с указанным типом решетки.

Финансирование работы. Работа выполнена при поддержке Министерства науки и высшего образования Российской Федерации (государственное задание # 075-00270-24-00). Никаких дополнительных грантов на проведение или руководство данным конкретным исследованием получено не было.

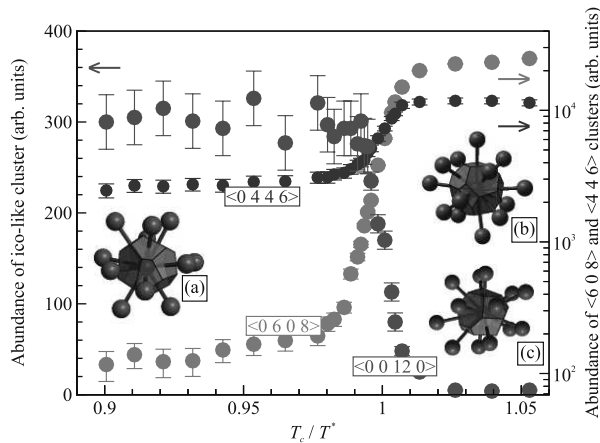


Рис. 3. (Цветной онлайн) Кристаллизация системы Юкавы. Концентрация многогранников Вороного с индексами $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$, $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$ и $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$ в зависимости от безразмерной температуры T_c/T^* , где T_c — температура кристаллизации системы. Резкий рост концентрации bcc-like кластеров (с индексами Вороного $\langle 0, 6, 0, 8 \rangle$) при кристаллизации системы сопровождается резким падением доли ico-like кластеров (с индексами Вороного $\langle 0, 0, 12, 0 \rangle$). Также при кристаллизации наблюдается рост концентрации кластеров $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$, которые доминируют в жидкой фазе. Типичный вид данных кластеров представлен на вставках: ico-like (a), bcc-like (b) и кластер $\langle 0, 4, 4, 6 \rangle$ (c)

Конфликт интересов. Автор данной работы заявляет, что у него нет конфликта интересов.

1. G.E. Abrosimova, D.V. Matveev, and A.S. Aronin, Phys. Usp. **65**, 227 (2022).
2. U. Gasser, E.R. Weeks, A. Schofield, P.N. Pusey, and D.A. Weitz, Science **292**, 5515, (2001).
3. V.E. Fortov and G.E. Morfill, *Complex and dusty plasmas: From Laboratory to Space*, CRC Press (2010).
4. A. Hirata, L. J. Kang, T. Fujita, B. Klumov, K. Matsue, M. Kotani, A. R. Yavari, and M. W. Chen, Science **341**, 376 (2013).
5. Y. Yang, J. Zhou, F. Zhu et al. (Collaboration), Nature **592**, 1 (2021).
6. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **66**, 288 (2023).
7. S. Plimpton and J. Comput. Phys. **117**(1), 1 (1995).
8. S. Hamaguchi, R. T. Farouki, and D. H. E. Dubin, J. Chem. Phys. **105**, 7641 (1996).
9. B. A. Klumov, JETP Lett. **114**, 406 (2021).

10. P. J. Steinhardt, D. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. Lett. **47**, 1297 (1981).
11. P. J. Steinhardt, D. R. Nelson, and M. Ronchetti, Phys. Rev. B **28**, 784 (1983).
12. A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **87**, 179 (1982).
13. A. C. Mitus and A. Z. Patashinskii, Phys. Lett. A **88**, 31 (1983).
14. G. I. Voronoi, Reine Angew. Math. **134**, 198 (1908).
15. P. R. ten Wolde, R. J. Ruiz-Montero, and D. Frenkel, J. Chem. Phys. **104**, 9932 (1996).
16. J. R. Errington, P. G. Debenedetti, and S. Torquato, J. Chem. Phys. **118**, 2256 (2003).
17. S. Torquato, T. M. Truskett, and P. G. Debenedetti, Phys. Rev. Lett. **84**, 2064 (2000).
18. Y. Jin and H. A. Makse, Physica A **98**, 5362 (2010).
19. B. A. Klumov, Y. Jin, and H. A. Makse, J. Phys. Chem. B **118**, 10761 (2014).
20. A. Blaaderen and P. Wiltzius, Science **270**, 1177 (1995).
21. J. Hernandez-Guzman and E. R. Weeks, PNAS **106**, 15198 (2009).
22. B. A. Klumov, Phys.-Uspekhi **53**, 1053 (2010)].
23. R. Xu, C. C. Chen, L. Wu et al. (Collaboration), Nat. Mater. **14**, 1099 (2015).
24. Y. Yang, C. C. Chen, M. C. Scott et al. (Collaboration), Nature **542**, 75 (2017).
25. H. W. Sheng, W. K. Luo, F. M. Alamgir, J. M. Bai, and E. Ma, Nature **439**, 419 (2006).
26. A. Baule, F. Morone, H. J. Herrmann, and H. A. Makse, Rev. Mod. Phys. **90**(1), 015006 (2018).
27. M. Hanifpour, N. Francois, S. M. V. Allaei, T. Senden, and M. Saadatfar, Phys. Rev. Lett. **113**, 148001 (2014).
28. Yu. D. Fomin, V. N. Ryzhov, B. A. Klumov, and E. N. Tsiok, J. Chem. Phys. **141**, 034508 (2014).
29. Y. Q. Cheng, E. Ma, and H. W. Sheng, Phys. Rev. Lett. **102**, 245501 (2009).
30. Y. Q. Cheng and E. Ma, Prog. Mater. Sci. **56**(4), 379 (2011).
31. T. C. Hufnagel, C. A. Schuh, and M. L. Falk, Acta Mater. **109**, 375 (2016).
32. J. Ding, Y. Q. Cheng, H. Sheng, M. Asta, R. O. Ritchie, and E. Ma, Nat. Commun. **7**, 13733 (2016).
33. S. A. Khrapak, B. A. Klumov, P. Huber, V. I. Molotkov, A. M. Lipaev, V. N. Naumkin, H. M. Thomas, A. V. Ivlev, G. E. Morfill, O. F. Petrov, V. E. Fortov, Yu. Malentschenko, and S. Volkov, Phys. Rev. Lett. **106**, 205001 (2011).
34. S. P. Pan, S. D. Feng, J. W. Qiao, W. M. Wang, and J. Y. Qin, Sci. Rep. **5**, 16956 (2015).