

УДК 533.75+536.4+536.92

PACS: 05.20.-y, 05.70.Fh, 64.70.F-, 64.60.-i

Пятый вириальный коэффициент для потенциалов Сазерленда, Морзе и Леннарда-Джонса

М.В.Ушкац, А.А.Гайша

*Национальный университет кораблестроения им. адмирала Макарова
Пр. Героев Сталинграда 9, Николаев 54025, Украина*

Разработана методика расчета пятого вириального коэффициента для различных потенциалов парного взаимодействия. С целью повышения эффективности вычислений эта методика была оптимизирована для использования графического процессора, что позволило в десятки раз увеличить скорость расчетов. Для потенциалов Сазерленда, Морзе и Леннарда-Джонса рассчитаны пятые вириальные коэффициенты в широком диапазоне температур. Для каждого из этих потенциалов получены соответствующие кривые конденсации и критические параметры. Исследования с помощью точного выражения группового разложения конфигурационного интеграла позволили прийти к выводу о значительно меньшем влиянии пятого вириального коэффициента в сравнении с коэффициентами низших порядков.

Ключевые слова: вириальный коэффициент, неприводимый интеграл, групповое разложение, конфигурационный интеграл, критические параметры.

Розроблена методика розрахунку п'ятого віриального коефіцієнта для різних потенціалів парної взаємодії. З метою підвищення ефективності розрахунків ця методика була оптимізована для використання графічного процесора, що дозволило в десятки разів збільшити швидкість обчислень. Для потенціалів Сазерленда, Морзе та Леннарда-Джонса були розраховані п'яті віріальні коефіцієнти в широкому діапазоні температур. Для кожного з цих потенціалів були отримані відповідні криві конденсації та критичні параметри. Дослідження за допомогою точного виразу групового розкладання конфігураційного інтегралу дозволяють зробити висновок щодо меншого впливу п'ятого віриального коефіцієнта у порівнянні із коефіцієнтами нижчих порядків.

Ключові слова: віриальний коефіцієнт, незвідний інтеграл, групове розкладання, конфігураційний інтеграл, критичні параметри.

The technique of the fifth virial coefficient calculation has been represented which is applicable for different types of interaction potential function. To improve computational performance this technique was optimized to use the GPU allowing increasing the speed of calculations dozens of times. The fifth virial coefficients for the Sutherland, Morse and Lennard-Jones potentials were calculated over a wide temperature range. The corresponding condensation curves and critical parameters were obtained for those potentials. The studies based on the exact expression of the configuration integral cluster expansion have indicated a much smaller effect of the fifth virial coefficient in comparison with the lower-order coefficients.

Keywords: virial coefficient, irreducible integral, cluster expansion, configuration integral, critical parameters.

Введение

Строгое описание плотных состояний вещества и, в частности, фазовых переходов первого рода, до сих пор остается актуальной проблемой статистической физики [1]. Несмотря на то, что практически любой потенциал парного взаимодействия $U(r)$, учитывающий притяжение и отталкивание молекул, должен при определенных условиях приводить к фазовым превращениям [2] (что подтверждают различные численные эксперименты на базе методов Монте-Карло [3, 4] и молекулярной динамики [4-6]), теория может описать такие превращения только либо для очень упрощенных модельных систем [7-9],

либо с использованием дополнительных гипотез и аппроксимаций [10-17].

Существующие сегодня строгие теоретические подходы базируются на классической однофазной статистике Гиббса [12] и используют либо уравнение Орнштейна-Цернике (ОЦ) [18], либо вириальное уравнение состояния (ВУС) [19]. К сожалению, оба подхода имеют серьезные ограничения.

ОЦ уравнение не замкнуто, и все использующиеся на практике замыкания, являются аппроксимациями, адекватность которых оценивается эмпирически. Кроме того, существуют области состояний, где решение ОЦ уравнения расходится [13-17, 20, 21]. Предположения

о том, что эти области в точности соответствуют фазовым переходам первого рода [13, 14, 20, 21] пока остаются недоказанными.

ВУС выводится на основе канонического или большого канонического распределения Гиббса различными методами [1, 12, 19, 22]. Каждый вириальный коэффициент B_{k+1} в этом уравнении однозначно связан с соответствующим неприводимым групповым интегралом β_k

$$B_{k+1} = -\frac{k}{k+1}\beta_k, \quad (1)$$

Все выводы ВУС используют приближение малой плотности. Точного количественного критерия адекватности вириального уравнения не существует. На практике обычно считается, что ВУС справедливо во всей области сходимости бесконечного вириального ряда.

Однако в работе [23] был предложен новый метод точного представления группового разложения конфигурационного интеграла без ограничений по плотности. В рамках этого подхода были пересмотрены границы адекватности ВУС и обнаружены точки начала процесса конденсации. Несмотря на то, что точное групповое разложение значительно отличается от вириального в области плотных состояний, конфигурационный интеграл по-прежнему выражается через неприводимые интегралы [23], а значит и через вириальные коэффициенты (1).

Как правило, вычисление второго вириального коэффициента, даже для сложных потенциалов взаимодействия, не представляет значительных трудностей [24]. К сожалению, определение вириальных коэффициентов высших порядков, в большинстве случаев, имеющих практический интерес, возможно уже только численными методами и представляет собой сложную техническую задачу даже для простейших потенциалов взаимодействия.

Некоторые исследователи [25-29] пытались уточнить уравнение состояния с учетом третьего и четвертого вириальных коэффициентов, а в отдельных (значительно упрощенных) случаях даже пятого и шестого коэффициентов [30-32]. Однако некоторые результаты противоречат друг другу в области низких температур [25-27]. Большинство данных имеют ограничения, как количественные (связанные с техническими трудностями), так и по диапазону температур (связанные с попытками упростить интегрирование).

Для потенциалов Леннард-Джонса, Морзе и Сазерленда [33] было установлено, что поведение ВУС с четырьмя вириальными коэффициентами все еще значительно отличается по сравнению с уравнением,

в котором учитываются только три из них. Поэтому целью данной работы было определение пятого вириального коэффициента (четвертого неприводимого интеграла) для различных потенциалов молекулярного взаимодействия в широком интервале температур, и исследование его влияния на поведение как ВУС, так и точного выражения для группового разложения конфигурационного интеграла [23].

Методика расчетов

Если для пары молекул с номерами i и j ввести, так называемую, функцию Майера

$$f(r_{ij}) = \exp\left(-\frac{u(r_{ij})}{kT}\right) - 1$$

где $u(r_{ij})$ – потенциал их взаимодействия, то каждый неприводимый групповой интеграл β_k будет определяться, как интеграл суммы всех возможных произведений функций Майера $(k+1)$ молекул по конфигурационной части их фазового пространства (а на практике – в бесконечных пределах), который не выражается через неприводимые интегралы низших порядков.

Для четвертого неприводимого интеграла (для пяти молекул) все возможные различные схемы таких произведений (или графы) показаны на рис. 1, где каждой функции Майера соответствует линия, соединяющая молекулы. Там же указана и кратность схем с учетом симметрии перестановок индексов молекул.

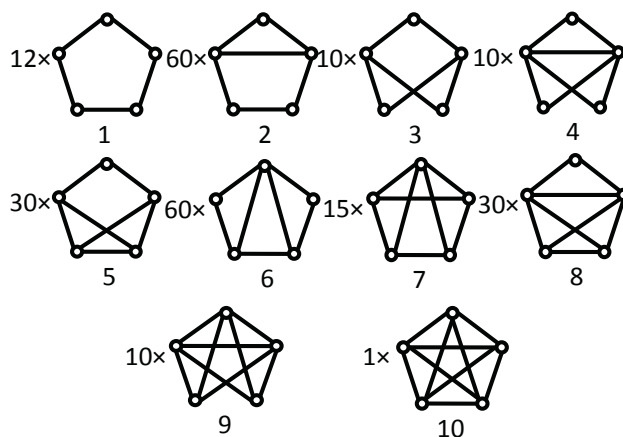


Рис.1. Неприводимые графы для пяти молекул.

Все эти схемы можно разбить на шесть различных групп (см. рис. 2). Интегралы внутри каждой группы отличаются друг от друга наличием или отсутствием одной функции Майера (пунктирная линия на рис.2) и только в пятой и шестой группах оказывается по

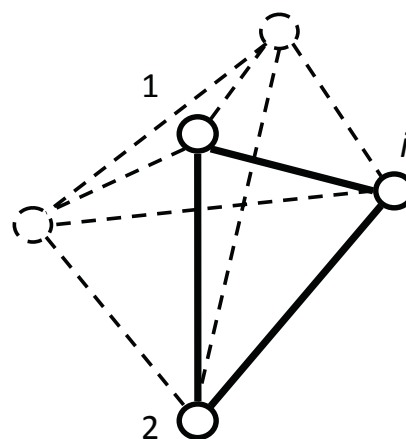
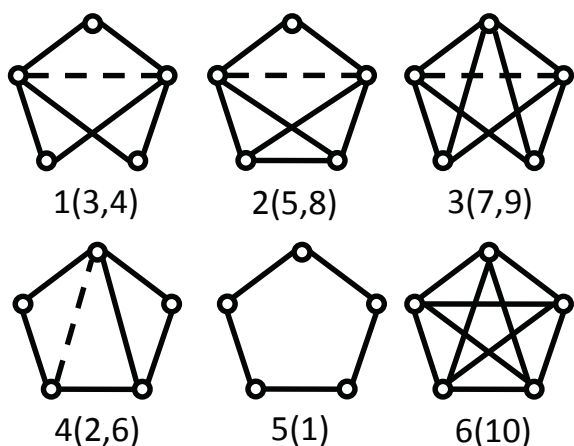


Рис.2. Группы подобных графов (в скобках показаны соответствующие номера графов на рис. 2).

Рис.3. Схема очередности интегрирования

одному интегралу (под номерами 1 и 10 на рис. 1, соответственно), которые принципиально отличаются от всех других.

Вместо расстояния между частицами r_{ij} введем безразмерный квадрат этого расстояния $s_{ij} = r_{ij}^2/D^2$, где D – некоторый размер, характерный для данного потенциала взаимодействия. Использование такой замены переменных позволяет значительно унифицировать и упростить процесс интегрирования. В частности, с помощью введения обратной переменной $t=1/s$ решается проблема интегрирования в бесконечных пределах – область интегрирования разбивается на два участка: в пределах от 0.0 до 1.0 по переменной s и от 1.0 до 0.0 по переменной t (т.е. в пределах s от 1.0 до ∞). Кроме того, во многих потенциалах взаимодействия понижается степень зависимости от r_{ij} , что положительно сказывается на точности интегрирования. Вместо функции Майера будем использовать

$$F(s) = f(D\sqrt{s}).$$

Выделим в каждой схеме две «основные» частицы 1 и 2, которые могут быть «связаны» или нет между собой функцией Майера в зависимости от схемы. Остальные три частицы также могут иметь или не иметь «связи» с двумя первыми и друг с другом (рис. 3).

При заданном положении первых двух молекул конфигурация такой системы полностью определяется набором из 8-ми независимых переменных: шестью величинами s_{1i}, s_{2i} и двумя углами φ_{ij} и φ_{ik} между плоскостью $1i2$ и плоскостями $1j2$ и $1k2$, соответственно. К этим восьми интегралам добавляется однократное (благодаря сферической симметрии) интегрирование по s_{12} . Однако такое 9-кратное интегрирование во всех графах кроме 6-го на рис. 2 (или 10-го на рис. 1) можно значительно упростить.

Введем функцию

$$F_0(s) = \int_0^\infty F(s_1) ds_1 \int_{(\sqrt{s_1}-\sqrt{s})^2}^{(\sqrt{s_1}+\sqrt{s})^2} F(s_2) ds_2. \tag{2}$$

Эта функция для любых трех частиц при известном безразмерном квадрате расстояния s между первой и второй соответствует интегралу по всем возможным положениям третьей, связанной с ними функциями Майера (s_1 и s_2 – безразмерные квадраты расстояния от третьей до первых двух).

Самым простым образом с использованием функции (2) выражаются интегралы β_{41}, β_{44} и β_{45} соответствующие группам 1, 4 и 5 на рис. 2

$$\left. \begin{aligned}
 \beta_{41} &= 10 \times \frac{(\pi D^3)^4}{4} \int_0^\infty [1 + F(s_{12})] [F_0(s_{12})]^2 \frac{ds_{12}}{s_{12}}; \\
 \beta_{44} &= 60 \times \frac{(\pi D^3)^4}{4} \times \\
 &\int_0^\infty [1 + F(s_{12})] F_0(s_{12}) \frac{ds_{12}}{\sqrt{s_{12}}} \int_0^\infty F(s_{13}) F_0(s_{13}) \frac{ds_{13}}{\sqrt{s_{13}}} \int_{(\sqrt{s_{13}-\sqrt{s_{12}}})^2}^{(\sqrt{s_{13}+\sqrt{s_{12}}})^2} F(s_{23}) ds_{23}; \\
 \beta_{45} &= 12 \times \frac{(\pi D^3)^4}{4} \int_0^\infty F_0(s_{12}) \frac{ds_{12}}{\sqrt{s_{12}}} \int_0^\infty F_0(s_{13}) \frac{ds_{13}}{\sqrt{s_{13}}} \int_{(\sqrt{s_{13}-\sqrt{s_{12}}})^2}^{(\sqrt{s_{13}+\sqrt{s_{12}}})^2} F(s_{23}) ds_{23}.
 \end{aligned} \right\} \quad (3)$$

Используя предварительное табулирование функции (2) в заранее известных узлах, 9-ти кратные интегралы сводятся к однократному β_{41} и тройным β_{44} , β_{45} .

Взяв за основу функцию (2) добавим к трем частицам четвертую, которая связана, как и третья, с двумя первыми, но имеет еще одну дополнительную связь с третьей. Обозначив угол между плоскостями 132 и 142 как φ , введем еще одну функцию

$$F_1(s, s_{13}, s_{23}) = \int_0^\infty F(s_1) ds_1 \int_{(\sqrt{s_1-\sqrt{s}})^2}^{(\sqrt{s_1+\sqrt{s}})^2} F(s_2) ds_2 \int_0^\pi F(s_3) d\varphi,$$

где $s_3 = f(s, s_1, s_2, s_{13}, s_{23})$ – безразмерный квадрат расстояния между третьей и четвертой частицами.

Тогда интегралы β_{42} , β_{43} соответствующие группам 2 и 3 на рис. 2 будут иметь вид

$$\left. \begin{aligned}
 \beta_{42} &= 30 \times \frac{(\pi D^3)^4}{4\pi} \times \\
 &\int_0^\infty [1 + F(s_{12})] F_0(s_{12}) \frac{ds_{12}}{s_{12}} \int_0^\infty F(s_{13}) ds_{13} \int_{(\sqrt{s_{13}-\sqrt{s_{12}}})^2}^{(\sqrt{s_{13}+\sqrt{s_{12}}})^2} F(s_{23}) ds_{23} F_1(s_{12}, s_{13}, s_{23}); \\
 \beta_{43} &= \frac{(\pi D^3)^4}{4\pi^2} \times \\
 &\int_0^\infty [15 + 10F(s_{12})] \frac{ds_{12}}{s_{12}} \int_0^\infty F(s_{13}) ds_{13} \int_{(\sqrt{s_{13}-\sqrt{s_{12}}})^2}^{(\sqrt{s_{13}+\sqrt{s_{12}}})^2} F(s_{23}) ds_{23} [F_1(s_{12}, s_{13}, s_{23})]^2.
 \end{aligned} \right\} \quad (4)$$

Сложность этих шестикратных интегралов приблизительно соответствует шестисвязному интегралу в четвертом вириальном коэффициенте [33]. Но самым громоздким, конечно же, представляется выражение для β_{46} – десятисвязного интеграла 6 на рис. 2

$$\beta_{46} = \frac{(\pi D^3)^4}{8\pi^2} \int_0^\infty F(s_{12}) \frac{ds_{12}}{s_{12}} \int_\infty^\infty dS_3 \int_\infty^\infty dS_4 \int_\infty^\infty dS_5 \int_0^\pi F(s_{34}) d\varphi_{34} \int_0^{2\pi} F(s_{45}) F(s_{35}) d\varphi_{35}, \quad (5)$$

где $\int_\infty^\infty dS_i = \int_0^\infty F(s_{1i}) ds_{1i} \int_{(\sqrt{s_{1i}-\sqrt{s_{12}}})^2}^{(\sqrt{s_{1i}+\sqrt{s_{12}}})^2} F(s_{2i}) ds_{2i}$.

Зная интегралы в (3, 4, 5), соответствующие всем возможным графам можно определить четвертый неприводимый интеграл

$$\beta_4 = \beta_{41} + \beta_{42} + \beta_{43} + \beta_{44} + \beta_{45} + \beta_{46}$$

или с помощью (1) пятый вириальный коэффициент.

Результаты и их обсуждение

Для исследования были выбраны четыре различных потенциала межмолекулярного взаимодействия: однопараметрический потенциал твердых сфер

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq D \\ 0, & r > D \end{cases},$$

двухпараметрические потенциалы Сазерленда

$$U(r) = \begin{cases} \infty, & r \leq D \\ -\varepsilon_0 \left(\frac{D}{r}\right)^6, & r > D \end{cases}$$

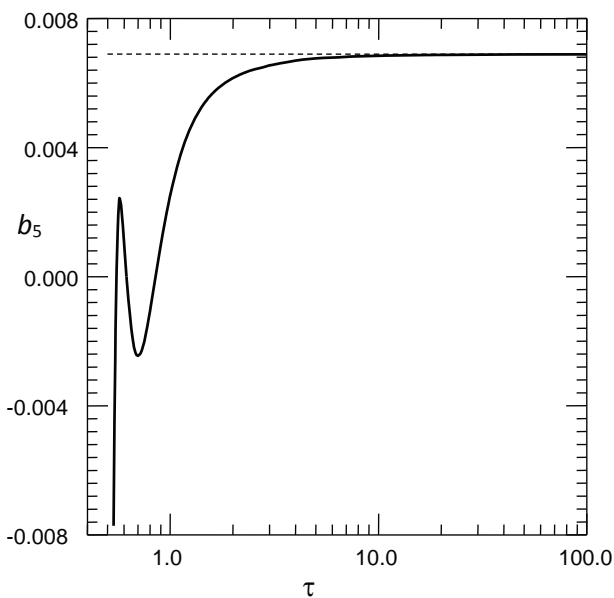


Рис.4. Зависимость пятого вириального коэффициента b_5 для потенциала Сазерленда от температуры τ . Пунктир показывает b_5 для твердых сфер.

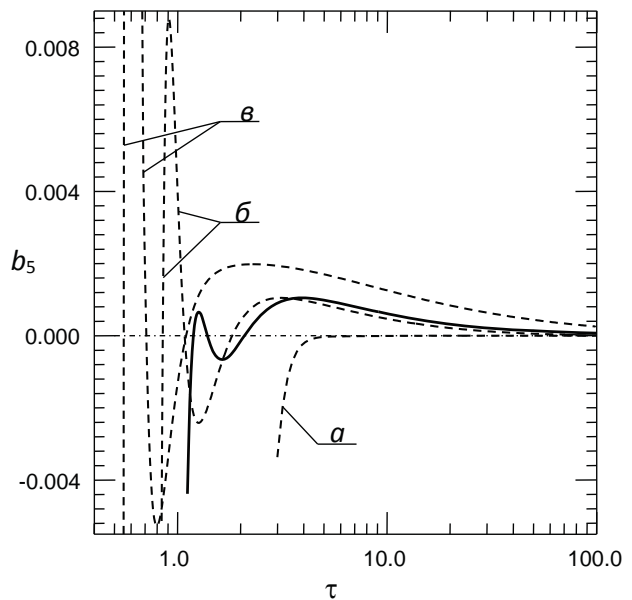


Рис.5. Зависимость пятого вириального коэффициента b_5 для потенциалов Леннарда-Джонса (сплошная линия) и Морзе (пунктир) от температуры τ .
а - $\alpha D = 3.0$; б - $\alpha D = 6.0$; в - $\alpha D = 9.0$.

и Леннард-Джонса (12-6)

$$U(r) = \epsilon_0 \left[\left(\frac{D}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{D}{r} \right)^6 \right],$$

а также трехпараметрический потенциал Морзе

$$U(r) = \epsilon_0 \left[e^{-2\alpha(r-D)} - 2e^{-\alpha(r-D)} \right].$$

Первые два потенциала использовались, скорее для проверки адекватности полученных выражений, а выбор последних двух обусловлен их широким применением в науке [34]. Все потенциалы содержат параметр D (диаметр молекулы или равновесное расстояние между парой молекул). Потенциалы Сазерленда, Леннард-Джонса и Морзе включают параметр ϵ_0 (энергия диссоциации парной связи), а потенциал Морзе содержит еще и параметр α .

Для этих потенциалов с помощью выражений (3, 4, 5) вычислялись значения пятого вириального коэффициента в безразмерном виде $b_5 = B_5/B_0$, где $B_0 = 4\pi D^3/3$, в широком диапазоне значений безразмерной температуры $\tau = kT/\epsilon_0$.

Для численного интегрирования в (3, 4, 5) использовался метод Гаусса, как оптимально сочетающий точность и простоту. С этой целью, предварительно были созданы таблицы узлов и весов интегрирования для различных значений числа узлов $n = 7, 10, 15, 20, 25, 30, 40, 60, 80, 100, 120$ [35].

Современные графические процессоры могут реализовывать аппаратную многопоточность, что делает повторяющиеся операции над числами с плавающей запятой в сотни раз эффективнее по сравнению с аналогичными вычислениями на базе центрального процессора. Возможности использования вычислительных функций графического процессора сегодня предоставляют (приблизительно в равном объеме) платформа CUDA и технология ComputeShader библиотеки DirectX11.

Соответственно, многомерное интегрирование в (4, 5) было адаптировано к многопоточным вычислениям. В интегралах (4) для каждого узла по s_{12} создавалась двумерная сетка узлов s_{13} и s_{23} , а вычисление $F_1(s_{12}, s_{13}, s_{23})$ производилось в потоковом режиме независимо для каждого узла сетки. Аналогичным образом, вычисление двойного интеграла в конце выражения (5) производилось независимо в узлах сетки интегралов по S_3, S_4 и S_5 .

Благодаря этому вычисление одного значения суммы $\beta_{42} + \beta_{43}$ для потенциалов Леннард-Джонса или Морзе при $n = 30$ занимало на ПК с графическим процессором GeForce GTS 450 около 1 секунды (для

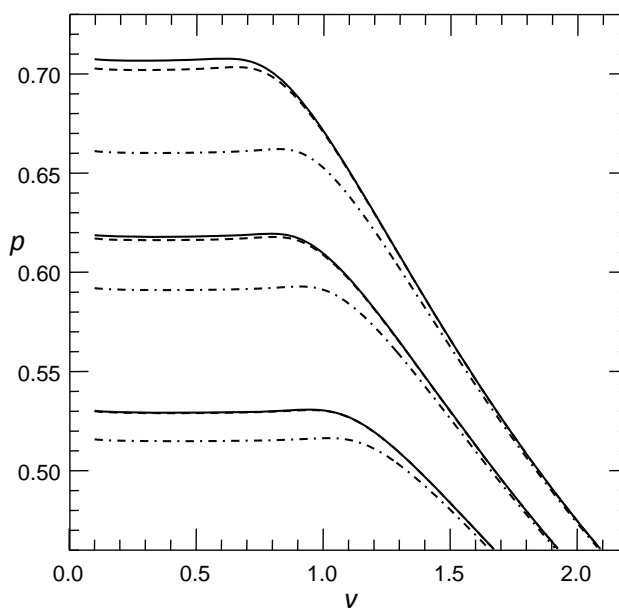


Рис.6. Субкритические изотермы уравнения [23] с тремя (штрих-пунктир), четырьмя (пунктир) и пятью (сплошная линия) вириальными коэффициентами для потенциала Леннард-Джонса при различных температурах (снизу вверх) $\tau : 1.2; 1.25; 1.29$.

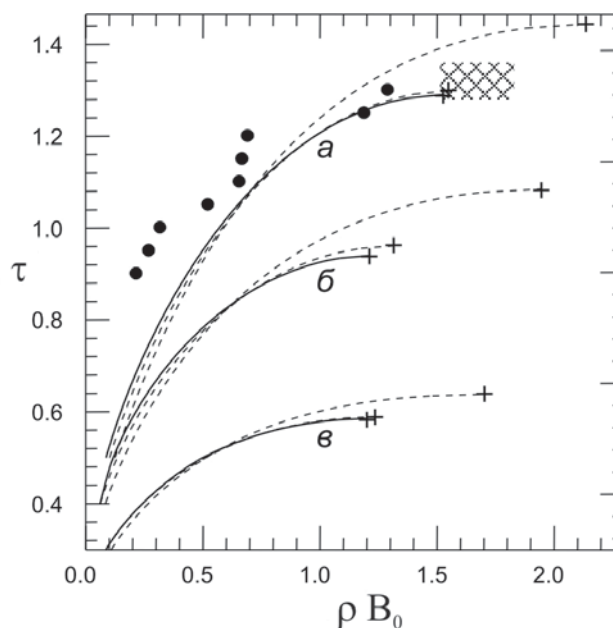


Рис.7. Кривые конденсации жидкости Леннард-Джонса (а) с учетом трех (штрих-пунктир), четырех (пунктир) и пяти (сплошная линия) вириальных коэффициентов, точки показывают результаты численного моделирования [6]. Заштрихованная область соответствует критическим параметрам согласно с данными различных исследований [3-6]. Также приводятся кривые конденсации для потенциалов Морзе (б, $\alpha D = 6.0$) и Сазерленда (в).

сравнения, на базе центрального процессора Intel Core i5 2.67 GHz такие же расчеты занимали около 1,5 мин. Расчеты одного β_{46} при $n = 15$, даже с использованием GPU, занимали около 1 часа.

Расчеты для твердых сфер уже при $n = 20$ дают значение $b_5 = 0,00691734487190843B_0^4$, которое хорошо согласуется с известным $b_5 = (0,0069 \pm 0,0002)B_0^4$ [36].

На рис. 4 показана зависимость b_5 от температуры τ для потенциала Сазерленда. Видно, что при $T \rightarrow \infty$ значение этого вириального коэффициента вполне закономерно стремится к b_5 для твердых сфер.

На рис. 5 изображены зависимости b_5 от температуры τ для потенциалов Леннард-Джонса и Морзе (для трех значений параметра α). Несмотря на то, что поведение потенциала Морзе при $\alpha D = 6,0$ считается близким к поведению потенциала Леннард-Джонса [34], их вириальные коэффициенты старших порядков значительно отличаются.

Используя точное выражение для группового разложения конфигурационного интеграла [23] и соответствующее ему уравнение состояния для безразмерного давления $p = PB_0 / \epsilon_0$ и объема $v = 1 / \rho B_0$ были рассчитаны изотермы для потенциала Леннард-Джонса с учетом различного числа вириальных коэффициентов (рис. 6). Видно, что пятый коэффициент изменяет изотермы значительно меньше по сравнению с четвертым.

В таблице 1 представлены значения критических температур, плотностей (числа частиц) и давлений для потенциалов Леннард-Джонса, Морзе и Сазерленда, рассчитанные с учетом различного числа вириальных

коэффициентов (от трех до пяти). Во всех случаях влияние пятого вириального коэффициента оказывается не таким значительным, как влияние четвертого. Для потенциала Леннард-Джонса критические параметры, полученные с учетом, как четырех, так и пяти вириальных коэффициентов, лежат в области известных экспериментальных значений [3-6]. Можно предположить, что влияние шестого вириального коэффициента окажется еще меньшим, а значит, в некоторых случаях для приближенных расчетов будет достаточно учитывать только первые пять из них.

С другой стороны, в области низких температур кривые конденсации заметно смещаются в область меньшей плотности под влиянием, как четвертого, так и пятого коэффициентов, постепенно приближаясь к экспериментальной бинадали (рис.7). Судя по всему, более точное определение положения кривой конденсации будет возможным только при учете коэффициентов высших порядков.

Выводы

Были получены точные выражения всех составляющих четвертого неприводимого интеграла (пятого вириального коэффициента) через интегральные функции, которые применимы для потенциалов парного взаимодействия различного вида (как гладких, так и кусочно-непрерывных). В будущем возможно использование подобных выражений для вычисления вириальных коэффициентов больших порядков.

На основе этих выражений был создан алгоритм

Таблица 1.

Критические параметры с учетом различного числа N вириальных коэффициентов для потенциалов Леннард-Джонса, Морзе и Сазерленда.

Критические параметры	Леннард-Джонса			Морзе ($\alpha D = 6,0$)			Сазерленда		
	$N = 3$	$N = 4$	$N = 5$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 5$	$N = 3$	$N = 4$	$N = 5$
kT_k / ϵ_0	1.4453	1.2992	1.2908	1.0849	0.96133	0.93999	0.63818	0.58882	0.58528
$\rho_k B_0$	2.1864	1.5839	1.5463	1.9794	1.3376	1.2242	1.7364	1.2544	1.2176
$P_k B_0 / \epsilon_0$	1.0539	0.72446	0.70728	0.71617	0.45746	0.41899	0.36952	0.26061	0.25354

численного расчета пятого вириального коэффициента адаптированный для использования современных средств аппаратного ускорения вычислений.

Получены значения пятого вириального коэффициента для потенциала твердых сфер, потенциалов Сазерленда, Морзе и Леннард-Джонса в широком диапазоне температур, которые могут непосредственно использоваться при исследованиях различных систем.

Для потенциалов Леннард-Джонса, Морзе и Сазерленда на основе точного выражения конфигурационного интеграла [23] были получены кривые конденсации и значения критических параметров с учетом вириальных коэффициентов до пятого, включительно. Исследования показали, что влияние вириальных коэффициентов на поведение системы постепенно уменьшается с ростом их порядка. По крайней мере, влияние пятого коэффициента на поведение изотерм и значения критических параметров для исследованных потенциалов оказалось значительно меньшим по сравнению с влиянием четвертого.

1. A. Isihara. Statistical physics, Academic Press, (1971), 452 p.
2. Andrea Collecchio, Wolfgang König, Peter Mörters, Nadia Sidorova. Communications in Mathematical Physics. 299, 3, 603-630 (2010).
3. Panagiotopoulos A. Z. Int. J. Thermophys. 15, 6, 1057-1072 (1994).
4. Phil Attard. J. Chem. Phys. 116, 9616 (2002).
5. Tatsuto Kimura, Shigeo Maruyama. Microscale Thermophysical Engineering. 6, 1, 3-13 (2002).
6. Wen-Ze Ou-Yang, Zhong-Yuan Lu, Tong-Fei Shi, Zhao-Yan Sun, Li-Jia An. J. Chem. Phys. 123, 234502 (2005).
7. M. Kac, G. E. Uhlenbeck, and P. C. Hemmer. J. Math. Phys. 4, 216 (1963).
8. J. L. Lebowitz, O. Penrose. J. Math. Phys. 7, 98 (1966).
9. R J Baxter. J. Phys. A: Math. Gen. 13, L61 (1980).
10. T. D. Lee, C. N. Yang, Phys. Rev. 87, 410 (1952).
11. K. Huang. Statistical Mechanics, John Wiley, New York, (1963), 493 p.
12. Р. Балеску. Равновесная и неравновесная статистическая механика, Мир, М. (1978), 405 с.
13. Саркисов Г. Н. УФН, 169, 625–642 (1999).
14. Саркисов Г. Н. УФН, 172, 647–669 (2002).
15. A. G. Vompe and G. A. Martynov. J. Chem. Phys. 106, 6095 (1997).
16. Мартынов Г. А. УФН, 169, 595–624 (1999).
17. E. M. Apfelbaum, V. S. Vorob'ev, G. A. Martynov. J. Chem. Phys. 127, 064507 (2007).
18. L. S. Ornstein and F. Zernike. Proc. Acad. Sci. 17, 793-806 (1914).
19. Дж. Майер, М. Гепперт-Майер. Статистическая механика, Мир, М. (1980), 544 с
20. D. A. Tikhonov, G. N. Sarkisov. Russ. J. Phys. Chem. 74, 3, 470–476 (2000).
21. I. Charpentier, N. Jakse. J. Chem. Phys. 123, 204910 (2005).
22. Боголюбов Н.Н. ОГИЗ. Проблемы динамической теории в статистической физике, Гос. изд-во техн.-теорет. лит., М. (1946), 118 с.
23. М.В. Ушкац. Вісник Харківського Національного Університету ім.В.Н.Каразіна, 1020, 6 (2012).
24. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч. Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей, Издательство иностранной литературы, М. (1961) 931 с.
25. Rowlinson J. S. Molecular Physics 6, 4, 429-439 (1963).
26. Katsura Shigetoshi. Phys. Rev. 115, 1417–1426 (1959).
27. Barker J. A., Monaghan J. J. J. Chem. Phys. 36, 2558-2564 (1962).
28. Вовченко А.И., Муленко И.А., Соловей В.Б. ЖТФ, Т.68, 7, 130-132 (1998).
29. Saija F. Phys. Chem. Chem. Phys. 13, 11885-11891 (2011).
30. Francis H. Ree, William G. Hoover. J. Chem. Phys. 40, 4, 939-950 (1964).
31. Kenneth M. Benjamin, Andrew J. Schultz, David A. Kofke. J. Phys. Chem. B, 113 (22), 7810–7815 (2009).
32. Julio G. Briano, Eduardo D. Glandt. J. Chem. Soc., Faraday Trans. 2, 76, 812-821 (1980).
33. Люлька О.Є., Ушкац М.В. Наукові доповіді призерів II туру Всеукраїнського конкурсу студентських наукових робіт з фізики: Зб. Наукових праць. – Суми, 53-58 (2012).
34. А.М.Кривцов, Н.В.Кривцова. Дальневосточный математический журнал ДВО РАН, Т.3, 2, 254-276 (2002).
35. Крылов В.И. Приближенное значение интегралов, Наука, М. (1967), 500 с.
36. Pathria R.K. Statistical mechanics, Butterworth-Heinemann (1996), 529 p.