

DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.220107

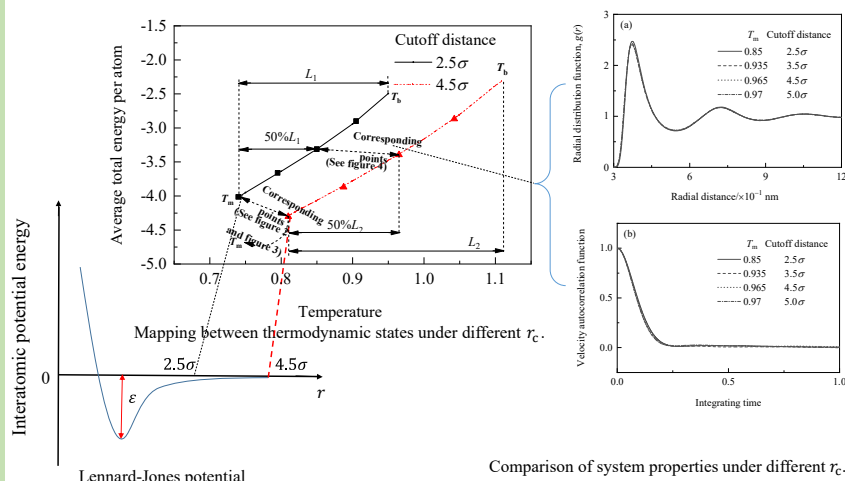
Application of cutoff distance selection in molecular dynamics simulation of LJ argon system

Chenyang SUN^{1,2}, Chaofeng HOU^{1*}, Wei GE^{1,2}

1. Institute of Process Engineering, Chinese Academy of Sciences, Beijing 100190, China

2. School of Chemical Engineering, University of Chinese Academy of Sciences, Beijing 100049, China

Abstract: In Lennard-Jones (LJ) potential argon system investigated by molecular dynamics simulation, the different cutoff distances are frequently applied to calculate the interactive force between atoms, and some reports have given out the influence of the cutoff distances on the simulation systems. More and more calculations suggest to use 4.5σ or even larger truncation distances (σ is the diameter of argon atom) to obtain the more accurate thermodynamic properties of the systems. In this work, a simple method was proposed to solve the problem of superheating encountered in the calculation of melting point by direct heating, where an independent track and ensemble at each temperature point are run. And then, the effect of different cutoff distances on the phase diagrams of the melting and boiling points of argon system in the NPT ensemble was studied. The melting point was in good agreement with the experimental and theoretically calculated values when the cutoff distance of 2.5σ was used. However, the deviation from the experimental melting point became more evident when the larger cutoff distances were employed. In order to find out the underlying mechanism behind the deviation, the radial distribution functions and velocity autocorrelation function at the melting points and different thermodynamic states of the liquid argon with different cutoff distances were analyzed. It was found that the same thermodynamic properties can be obtained at the corresponding thermodynamic state points under different truncation distances. The mapping between the different thermodynamic state points was understandable due to the different thermodynamic states at the same temperatures under the varied truncation distances, and was beneficial to significantly reduce the computational workload at the smaller cutoff distance. This work proposed an exploratory way for the selection of the cutoff distance in the simulation of liquid argon, where the truncation distance of 2.5σ can meet the requirements of computational accuracy and performance in the simulations.



systems. In this work, a simple method was proposed to solve the problem of superheating encountered in the calculation of melting point by direct heating, where an independent track and ensemble at each temperature point are run. And then, the effect of different cutoff distances on the phase diagrams of the melting and boiling points of argon system in the NPT ensemble was studied. The melting point was in good agreement with the experimental and theoretically calculated values when the cutoff distance of 2.5σ was used. However, the deviation from the experimental melting point became more evident when the larger cutoff distances were employed. In order to find out the underlying mechanism behind the deviation, the radial distribution functions and velocity autocorrelation function at the melting points and different thermodynamic states of the liquid argon with different cutoff distances were analyzed. It was found that the same thermodynamic properties can be obtained at the corresponding thermodynamic state points under different truncation distances. The mapping between the different thermodynamic state points was understandable due to the different thermodynamic states at the same temperatures under the varied truncation distances, and was beneficial to significantly reduce the computational workload at the smaller cutoff distance. This work proposed an exploratory way for the selection of the cutoff distance in the simulation of liquid argon, where the truncation distance of 2.5σ can meet the requirements of computational accuracy and performance in the simulations.

Key words: molecular dynamics simulation; LJ potential; cutoff distance; liquid argon

收稿: 2020-03-27, 修回: 2020-05-10, 网络发表: 2020-05-25, Received: 2020-03-27, Revised: 2020-05-10, Published online: 2020-05-25

基金项目: 国家自然科学基金(编号: 21776280; 91834303; 91934302); 中国科学院资助项目(编号: XDC01040100; QYZDJ-SSW-JSC029); 北京市自然科学基金委员会-北京市教育委员会联合资助项目(编号: KZ201910017019); 多相复杂系统国家重点实验室自主研究课题(编号: MPSCS-2019-A-10)

作者简介: 孙晨阳(1993-), 男, 山东省滨州市人, 硕士研究生, 化学工程专业, E-mail: chysun@ipe.ac.cn; 侯超峰, 通讯联系人, E-mail: cfhou@ipe.ac.cn.

引用格式: 孙晨阳, 侯超峰, 葛蔚. LJ 势氩系统分子动力学模拟中截断半径的选择. 过程工程学报, 2021, 21(3): 259-264.

Sun C Y, Hou C F, Ge W. Application of cutoff distance selection in molecular dynamics simulation of LJ argon system (in Chinese). Chin. J. Process Eng., 2021, 21(3): 259-264, DOI: 10.12034/j.issn.1009-606X.220107.

LJ 势氩系统分子动力学模拟中截断半径的选择

孙晨阳^{1,2}, 侯超峰^{1*}, 葛蔚^{1,2}

1. 中国科学院过程工程研究所, 北京 100190

2. 中国科学院大学化学工程学院, 北京 100049

摘要:近年来在分子动力学方法研究 LJ(Lennard-Jones)势氩系统时, 越来越多的计算建议采用 4.5σ 甚至更大的截断半径(σ 为氩原子直径)。本工作研究了不同截断半径对等温等压 NPT 系综氩系统熔沸点相图的影响, 分析了不同截断半径下在氩系统的熔点及液相区域不同热力学状态点的径向分布函数和速度自相关函数。结果表明, 以熔点为基准, 在距离其相同液态温区分率的热力学温度点能获得相同的热力学性质, 2.5σ 的截断半径在模拟的准确性和计算性能上均能满足模拟的要求, 本工作为液氩模拟中截断半径的选择指明了一个新的思考方向。

关键词: 分子动力学模拟; LJ 势; 截断半径; 液氩

中图分类号: TQ460.6+4

文献标识码: A

文章编号: 1009-606X(2021)03-0259-06

1 前言

分子动力学模拟(Molecular Dynamics Simulation, MD)是一种在原子分子尺度的计算机模拟方法, 主要依靠对经典牛顿运动方程的求解模拟体系内粒子的运动, 得到粒子的位置信息和动量信息, 再根据经典力学和统计物理理论获得体系的热力学量和其他宏观性质, 是研究凝聚态平衡和非平衡热力学过程的重要理论手段^[1]。随着计算机计算能力的迅猛发展, 分子动力学模拟技术逐步成熟。目前, 分子动力学模拟已广泛应用于化学、物理、材料、生物、医药等领域, 在解释物质和热力学过程的微观机理方面发挥了不可替代的作用。

在氩原子体系的 MD 模拟中, 截断半径的合理使用对模拟的准确性和积分算法的选取有重要作用^[2,3]。为减少计算量, 节约计算资源, 通常计算时只考虑与原子相距小于截断半径 r_c (Cutoff Distance)的近邻原子的贡献。但统计研究发现模拟过程中原子间力的截断取舍导致的能量损耗, 可能会对系统的热力学性质有明显影响。近年来由于计算能力提升, 对于采用 LJ 势函数的模拟系统, 越来越多的计算建议采用 4.5σ 甚至更大的截断半径。Rutkai 等^[4]考虑, 由于完全忽略了超过 $r_c=2.5\sigma$ 的远程相互作用, 使用带有截断的 LJ 势在计算惰性元素液体密度、等压热容、声速等方面与通过状态函数理论计算的结果存在明显偏差。此外, 在气液两相界面动力学性质和界面密度^[5]、纳米流体表面力场的计算^[6]和高频率相互作用诱导散射谱^[7]等研究方面, 均建议使用相对较大的截断半径来避免大的模拟偏差。然而对于径向分

布函数和速度自相关函数的计算, 虽然已有文献研究截断半径的影响, 但并未分析影响背后的底层物理机制。

本工作通过研究不同截断半径下 NPT 系综氩系统的熔沸点相图及径向分布函数和速度自相关函数的变化, 提出了一种氩体系分子动力学模拟中截断半径选择的新的思考方向。

2 模拟方法

在分子动力学模拟中, 原子间作用势函数的选取对模拟结果起决定性作用。Lennard-Jones(LJ)12-6 势在氩原子体系的模拟中广泛应用, 是准确描述氩等惰性气体原子之间相互作用的最重要的势函数之一。常用的 Lennard-Jones 12-6 势函数的表达式如下:

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

式中, 参数 ϵ 与 σ 分别为能量特征常数与长度特征常数, r_{ij} 为粒子 i 与 j 之间的距离。

对所有物理量以体系中原子质量 m 、Lennard-Jones 势中的能量特征参数 ϵ 、长度特征参数 σ 进行无量纲化处理, 分子间距 $r^*=r/\sigma$, 长度 $L=L/\sigma$, 温度 $T=kT/\epsilon$, 能量 $u^*=u/\epsilon$, 时间 $t^*=t(\epsilon/m\sigma^2)^{1/2}$ 。氩的基本参数^[8,9]为: 单位长度 0.3405 nm, 单位质量 6.636×10^{-26} kg, 单位温度 119.8 K, 单位时间 2.157×10^{-12} s, 单位能量 1.655×10^{-21} J。

应用开源软件 LAMMPS(22Aug18)进行算例设计与计算。模拟体系包含 2048 个原子, 采用周期性边界条件, 模拟系综为 NPT, 使用 Verlet 速度时间积分和

Nose-Hoover 控温控压方法,统计的时间步长为 0.001(约化单位制)。分别在截断半径为 2.0σ , 2.5σ , 3.5σ , 4.5σ , 5.0σ 下分析 NPT 系综氩体系各自熔点和液体区域 2 个对应温度(相对熔点增加的相对温度分率为 50%, 见表 1)的径向分布函数和速度自相关函数。粒子的初始位置按面心立方 FCC 晶格构型排布, 初始速度分布满足麦克斯韦-玻尔兹曼分布。

表 1 $p=101\text{ kPa}$ 时 NPT 系综中氩原子系统不同截断半径下的液氩热力学状态温度范围
Table 1 Thermodynamic temperature range of liquid argon at different cutoff distances at $p=101\text{ kPa}$ in the NPT ensemble

Cutoff distance	Melting point, T_m	$T_m+50\%L$	Boiling point, T_b	Liquid temperature range, L
2.0σ	0.63	0.72	0.81	0.18
2.5σ	0.74	0.85	0.96	0.22
3.5σ	0.79	0.935	1.08	0.29
4.5σ	0.81	0.965	1.12	0.31
5.0σ	0.81	0.97	1.13	0.32

Note: Experimental melting point and boiling point of argon system are 82.95 K and 86.45 K^[19], the corresponding dimensionless values are 0.69 and 0.72, respectively (all physical quantities in the table are in reduced units).

3 分析与讨论

3.1 不同截断半径下氩原子体系 NPT 系综熔沸点变化

考察了不同截断半径对氩体系熔沸点相图的影响。通常计算物质熔点有滞后法^[10-12]、两相固液共存法^[13,14]和自由能法^[15,16]等。两相固液共存法通过降低成核自由能的势垒模拟固液共存状态来计算熔点,该方法计算较准确,但模拟温度的扰动需限制在熔点附近。自由能方法计算较复杂,计算量大,尤其液体的自由能很难准确计算。滞后法直接简单,通过模拟类似实验加热或冷却过程计算熔点,但由于连续升温或冷却不能保证体系在较短模拟时间内达到热力学平衡状态,存在过热和过冷的现象(滞后现象),观测到的体系融化和凝固的温度与理论值存在一定偏差。对于加热过程,融化滞后的程度与模拟中使用的原子间作用势函数以及体系的加热速度有关,计算的熔点误差约为 $0.1T_m\sim0.5T_m$ ^[10,12]。加热速率越快,体系过热程度越大,误差越大。为消除加热过程伴随的误差,在每个温度点均采用单独算例进行计算。在外压为一个大气压的 NPT 系综下,每原子平均总能(势能+动能)随温度的变化曲线如图 1 所示。每个模拟运行 100 万步,取最后达到热力学平衡状态的 30 万步计算单原子总能的平均值。通过一系列不同温度下氩体系热力学平衡状态的计算,根据文献[17,18]给出的判据,获取了体系在不连续跳变点的熔点和沸点信息。可看出,随温度的上升模拟体系由固体逐渐转变为液体,在熔点时每原子平均总能明显增大,继续升温至沸点时,原子平均总能突然跳变,体积急速膨胀达到气态,完全进入气相状态,模拟过程复现了固、液、气三相转变过程。氩原子系统在不同截断半径下熔沸点的数据对比见表 1。截断半径 2.5σ 时,计算的熔点与实验值(82.95

K)^[19]的误差约为 $0.069T_m$ (误差由计算得到的无量纲熔点减去真实的无量纲熔点再除以该真实的无量纲熔点得到),远小于滞后法加热测得的熔点,与文献[20,21]模拟的结果一致,验证了模拟计算的可靠性。截断半径为 2.0σ 时熔点的计算误差约为 $0.09T_m$, 显著大于截断半径 2.5σ 的计算误差。对于直接加热法,从初始晶格点阵排布的固态融化获取熔点会因过热滞后现象导致计算的熔点偏高,而截断半径 2.0σ 时计算的熔点已显著小于氩的真实熔点,实际计算的熔点应该更低,因此,不建议采用 2.0σ 的截断半径。

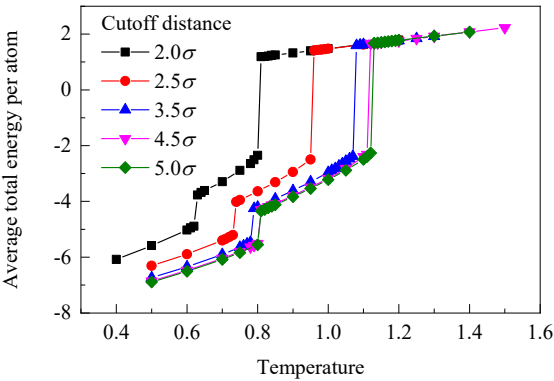


图 1 $p=101\text{ kPa}$ 时 NPT 系综中氩原子系统不同截断半径下的每原子平均总能随温度的变化
Fig.1 Variations of the average total energy per atom with temperature at different cutoff distances of the argon system at $p=101\text{ kPa}$ in the NPT ensemble

从表 1 和图 1 可以看出,不同截断半径下氩系统的熔沸点存在显著变化。增大截断半径,体系达到相变点的温度越高,熔点与实验值偏离越大,且截断半径为 4.5σ 和 5.0σ 时,熔沸点相变温度相差很小,表明 NPT 系综在截断半径为 4.5σ 以上时截断半径的影响已经很弱。

截断半径越大, 液态区域所覆盖温度的范围越大, 不同的截断半径导致了模拟的氩体系存在不同的热力学液态温度范围。

3.2 不同截断半径下氩原子体系 NPT 系综熔点及液态热力学状态点的热力学性质

利用 LAMMPS 复现了 Anikeenko 等^[22]在截断半径 2.5σ 、统计约化温度 0.85 下液态氩体系的扩散系数。根据 Lee^[23]研究的体系规模对扩散系数的影响, 用 2048 个粒子在 NVT 系综下得到体系扩散系数 $D=2.385\times 10^{-3} \text{ nm}^2/\text{ps}$, 与文献^[22]一致。另外, 复现了 Huang 等^[24]在高温高压条件下研究的 NPT 系综下截断半径对径向分布函数(Radial Distribution Function, RDF)的影响的部分工作, 如图 2 所示。第一、二峰的出现位置与文献^[24]基本一致。但由于模拟体系原子数目和径向统计网格宽度不同, 第一峰的强度存在细微差别, 该结果验证了本模拟工作的可靠性。虽然 Huang 等使用了相同温度下不同截断半径的 RDF 对比, 但由于不同截断半径会造成氩原子体系熔沸点相图的变化, 此时相同的温度并不代表二者体系处于相同的热力学状态。例如模拟温度为 0.8, 在截断半径为 2.5σ 时体系为液态, 截断半径为 4.5σ 时体系为固体。因此, 图 2 中相同温度下 RDF 第一峰峰高的差异可能是体系处于不同的热力学状态造成的。

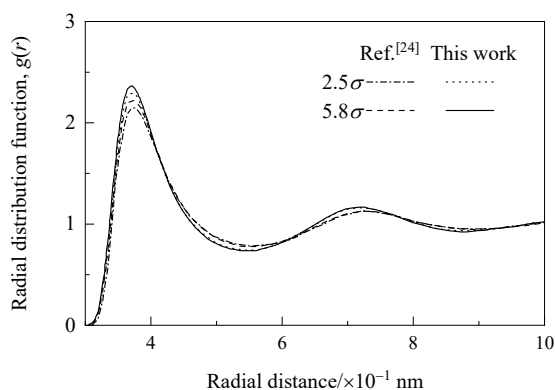


图2 NPT 系综、 $T=133 \text{ K}$ 、 $p=20 \text{ MPa}$ 液氩体系不同截断半径下径向分布函数与文献结果^[24]的比较

Fig.2 Comparison of RDF between the system and the literature results^[24] under different cutoff distances of liquid argon system in NPT ensemble of $T=133 \text{ K}$, $p=20 \text{ MPa}$

为了分析不同截断半径下液体热力学性质的变化, 以不同截断半径下的熔点为基准温度点, 考察熔点及离熔点相同温度比例的液相区域两个热力学状态点的径向分布函数和速度自相关函数(Velocity autocorrelation function, VACF)(详细参数见表 1)。计算了体系在不同截断半径下各自熔点处的 RDF 和 VACF。体系的模拟时长

为 100 万步(归约时间步长为 0.01), RDF 的计算基于最后 30 万步体系的平均结果。在 100 万步之后使用 0.001 的时间步长再运行 1 万步统计体系的 VACF, 结果如图 3 和 4 所示, 不同截断半径下对应各自熔点的径向分布函数和速度自相关函数高度一致。

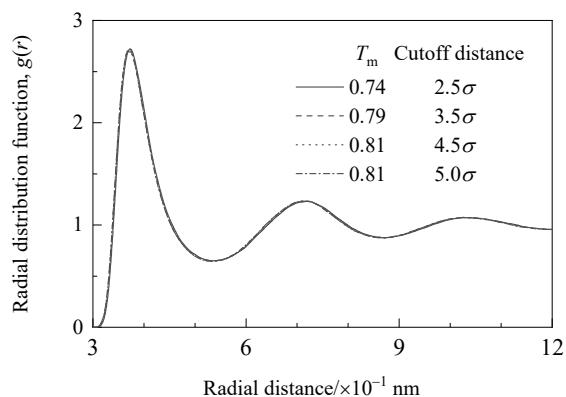


图3 $p=101 \text{ kPa}$, NPT 系综液氩体系不同截断半径下各自熔点径向分布函数的比较

Fig.3 Comparison of the RDF of the respective melting points at different cutoff distances in the NPT ensemble at $p=101 \text{ kPa}$

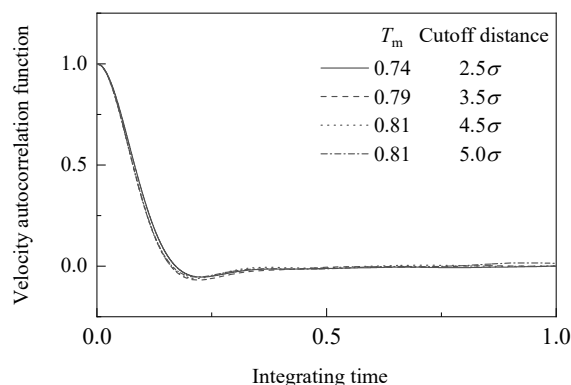


图4 $p=101 \text{ kPa}$, NPT 系综液氩体系不同截断半径下各自熔点速度自相关函数的比较

Fig.4 Comparison of VACFs at the respective melting points with different cutoff distances in the NPT ensemble at $p=101 \text{ kPa}$

虽然不同截断半径造成了体系熔点温度不同, 但熔点处表达的热力学状态相同。RDF 和 VACF 的高度一致表明不同截断半径下各自熔点处体系的平均配位原子分布相同, 液体的结构和热力学性质近似。以此为基础, 分别统计了距离熔点相同温度分率的温度点($T_m+50\%L$)所对应的热力学状态的径向分布函数和速度自相关函数, 如图 5 所示。从图中可以看出, 在对应热力学状态一致的状态下, 即便截断半径和对应温度不同, 体系的径向分布函数和速度自相关函数未发生根本改变, 统计曲线基本一致。图中出现细微差距的原因可能与热力学

状态相同点的温度精度、统计时域和数值波动等的影响有关。所以在模拟液体的结构和热力学性质时,不必过分追求大的截断半径,可考虑以熔点为基准点计算其在相同的液态温区长度分率的状态点来表达近似相同的

热力学状态(图 6,其中 L_1 和 L_2 分别为对应 2.5σ 和 4.5σ 截断半径下液态温区的范围, T_m 和 T_b 为每种模拟状况下的熔点和沸点),因为此时它们具有近似相同的体系空间结构稳定性和时间关联性。

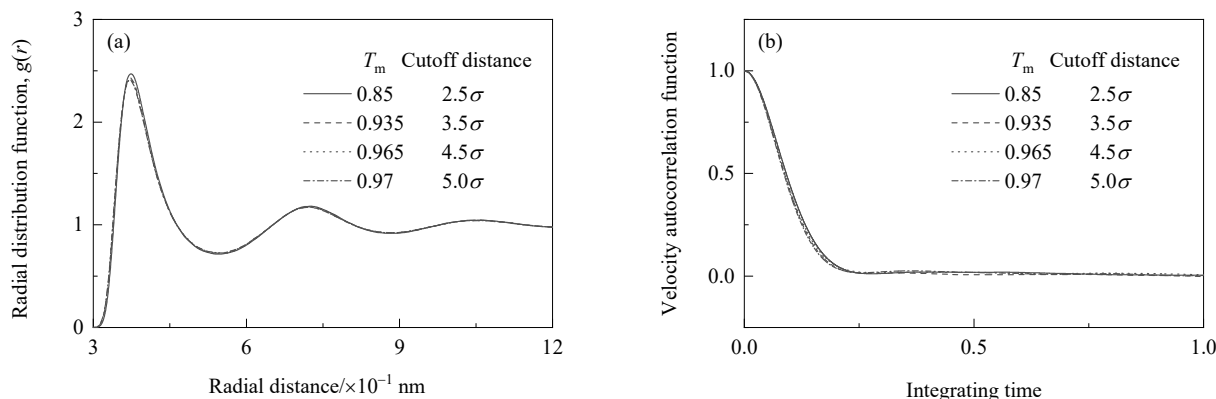


图5 $p=101$ kPa, NPT 系综液氩体系不同截断半径下距离熔点 50%液态温区长度的温度点($T_m+50\%L$)的径向分布函数和速度自相关函数的比较

Fig.5 Comparisons of the RDF and VACF at the liquid temperature ($T_m+50\%L$) under different cutoff distances in the NPT ensemble at $p=101$ kPa

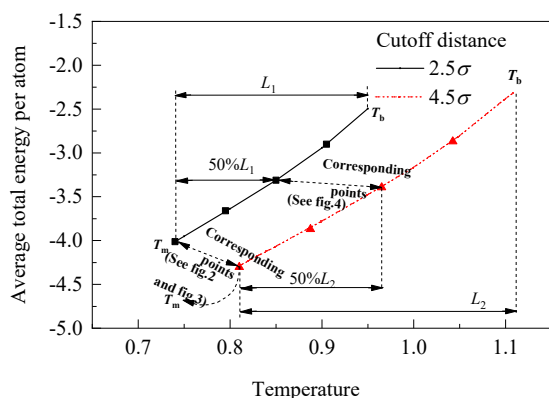


图6 不同截断半径下液氩体系不同热力学状态点之间的映射

Fig.6 Mapping between different thermodynamic state points under different cutoff distances

3.3 不同截断半径下的相同规模算例的计算性能

图 7 为基于不同截断半径下的一个 NPT 系综热力学状态点($T_m+50\%L$)的计算时长分析,体系规模同表 1,每 2 步检查一次邻居列表,运行 1 万步,并统计程序的总计算时长、力计算耗时、更新邻居列表耗时等。测试运行环境为 CentOS release 6.5 (Final) Kernel 2.6.32-431.el6.x86_64, CPU 为 Intel(R) Xeon(R) CPU E5-2630 v4 (2.20 GHz),内存为 DDR3 64GB, LAMMPS 使用 icpc 编译加-O3 优化选项。由图 7 可知,截断半径越大,计算耗时越长,计算性能显著下降。当选用截断半径 2.5σ 时,在不影响 RDF 和 VACF 计算结果的条件下,总计

算性能、力计算部分计算能力和邻居列表更新部分计算性能分别为截断半径为 4.5σ 时的 4.43 倍、4.71 倍和 4.06 倍。

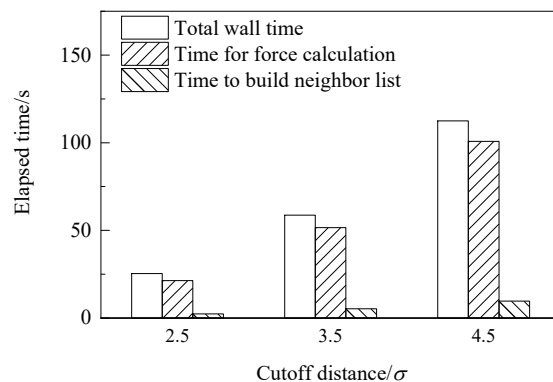


图7 不同截断半径下液氩体系相同热力学状态点($T_m+50\%L$)模拟计算的性能对比

Fig.7 Performance comparison of simulation calculation for the same thermodynamic state point ($T_m+50\%L$) of liquid argon system under different cutoff distances

4 结论

研究了不同截断半径下 NPT 系综氩原子系统熔沸点相图的变化,统计分析了熔点处及液相区域不同热力学状态点的径向分布函数和速度自相关函数,得到如下结论:

(1) 以不同截断半径下的熔点状态为基准,在距离

其相同液态温区分率的热力学温度点可获得相同的热力学性质。

(2) 从模拟的准确性和计算性能出发, 2.5σ 的截断半径能满足计算径向分布函数和速度自关联函数等热力学性质的要求。

参考文献

- [1] Li Z, Borrmann A, Craig M C. Wavelet analysis of condensed phase molecular dynamics [J]. *Chemical Physics Letters*, 1993, 214(3): 362–366.
- [2] Sun Y G, Guo Y F, Yang H. A molecular dynamics study of crosslinked epoxy networks: construction of atomistic models [J]. *Molecular Simulation*, 2020, 46(2): 121–127.
- [3] Wu X, Brooks B R. The homogeneity condition: a simple way to derive isotropic periodic sum potentials for efficient calculation of long-range interactions in molecular simulation [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2019, 150(21): 214109.
- [4] Rutkai G, Thol M, Span R, et al. How well does the Lennard-Jones potential represent the thermodynamic properties of noble gases? [J]. *Molecular Physics*, 2017, 115(9/10/11/12): 1104–1121.
- [5] Toghraie S D, Azimian A R. Molecular dynamics simulation of liquid–vapor phase equilibrium by using the modified Lennard-Jones potential function [J]. *Heat and Mass Transfer*, 2010, 46(3): 287–294.
- [6] Barisik M, Beskok A. Equilibrium molecular dynamics studies on nanoscale-confined fluids [J]. *Microfluidics and Nanofluidics*, 2011, 11(3): 269–282.
- [7] Teboul V, Chausseidant S. Cutoff effect in molecular dynamics simulations of interaction induced light scattering spectra [J]. *Computer Physics Communications*, 1997, 105(2): 151–158.
- [8] Anikeenko A V, Malenkov G G, Naberukhin Y I. Visualization of vortex movements in a molecular dynamics model of liquid argon [J]. *Doklady Physical Chemistry*, 2017, 472(1): 16–18.
- [9] Ohtomo N, Tanaka Y. Liquid argon: molecular dynamics calculations for the dynamic properties [J]. *Journal of the Physical Society of Japan*, 1987, 56(8): 2801–2813.
- [10] Luo S, Ahrens T J. Superheating systematics of crystalline solids [J]. *Applied Physics Letters*, 2003, 82(12): 1836–1838.
- [11] Luo S, Strachan A, Swift D C. Nonequilibrium melting and crystallization of a model Lennard-Jones system [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2004, 120(24): 11640–11649.
- [12] Zheng L Q, An Q, Xie Y, et al. Homogeneous nucleation and growth of melt in copper [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2007, 127(16): 164503.
- [13] Eike D M, Brennecke J F, Maginn E J. Toward a robust and general molecular simulation method for computing solid–liquid coexistence [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2005, 122(1): 14115.
- [14] Tang Y W, Wang J, Zeng X C. Molecular simulations of solid–liquid interfacial tension of silicon [J]. *The Journal of Chemical Physics*, 2006, 124(23): 236103.
- [15] Zou Y C, Xiang S K, Dai C D. Investigation on the efficiency and accuracy of methods for calculating melting temperature by molecular dynamics simulation [J]. *Computational Materials Science*, 2020, 171: 109156.
- [16] Davie S J, Reid J C, Searles D J. Free energy calculations with reduced potential cutoff radii [J]. *Journal of Chemical Theory and Computation*, 2013, 9(4): 2083–2089.
- [17] Chen M H, Hung L D, Huang C, et al. The melting point of lithium: an orbital-free first-principles molecular dynamics study [J]. *Molecular Physics*, 2013, 111(22/23): 3448–3456.
- [18] Solca J, Dyson A J, Steinebrunner G, et al. Melting curve for argon calculated from pure theory [J]. *Chemical Physics*, 1997, 224(2): 253–261.
- [19] Horovitz K L, Miller E P. Structure of liquid argon [J]. *Nature*, 1940, 146: 459–460.
- [20] Chung J. Study on the melting point of Ar by molecular dynamic simulation [J]. *Korean Journal of Air-Conditioning and Refrigeration Engineering*, 2007, 19(12): 883–888.
- [21] Muguruma C, Okamoto Y. Monte Carlo study of first-order phase transitions of a bulk Lennard-Jones fluid system in the isobaric-multithermal ensemble [J]. *Bulletin of the Chemical Society of Japan*, 2008, 81(6): 697–702.
- [22] Anikeenko A V, Naberukhin Y I. Large-scale and long-term correlations in collective motions of atoms of liquid argon. computer simulation [J]. *JETP Letters*, 2017, 106(5): 290–294.
- [23] Lee S H. Size effect on transport properties of liquid argon: a molecular dynamics simulation study [J]. *Journal of the Korean Chemical Society*, 2014, 58(5): 500–503.
- [24] Huang C, Li C, Choi P Y K, et al. Effect of cut-off distance used in molecular dynamics simulations on fluid properties [J]. *Molecular Simulation*, 2010, 36(11): 856–864.