

Supplementary information

Table 1. Results from MD simulations. The computed properties are the number density (n^*), the volume per particle ($v^* = 1/n^*$), pressure (P^*), potential energy ($U_{\text{pot}}/Nk_{\text{B}}T$), enthalpy per particle (H^*/N), and compression factor (Z). Data in the two-phase region have been omitted in the table.

T^*	n^*	v^*	P^*	$U_p^*/Nk_{\text{B}}T^*$	H^*/N	Z
2.00	0.0010±0.0000	1000±4	0.0020±0.0000	-0.0011±0.0001	4.9977±0.0003	1.000±0.006
2.00	0.0100±0.0000	100.0±0.3	0.0200±0.0001	-0.0222±0.0002	4.9525±0.0006	0.998±0.004
2.00	0.0500±0.0001	19.99±0.06	0.0996±0.0003	-0.1100±0.0004	4.772±0.001	0.996±0.004
2.00	0.1000±0.0002	10.00±0.02	0.2000±0.0003	-0.2177±0.0005	4.564±0.002	1.000±0.002
2.00	0.1250±0.0002	8.00±0.01	0.2514±0.0004	-0.2706±0.0006	4.470±0.002	1.005±0.002
2.00	0.1666±0.0002	6.001±0.008	0.3401±0.0005	-0.3583±0.0007	4.324±0.002	1.020±0.002
2.00	0.2000±0.0003	4.999±0.008	0.4152±0.0007	-0.4283±0.0007	4.219±0.002	1.038±0.002
2.00	0.3000±0.0003	3.333±0.003	0.6761±0.0008	-0.6360±0.0006	3.982±0.002	1.127±0.002
2.00	0.4000±0.0002	2.500±0.002	1.034±0.001	-0.8437±0.0005	3.898±0.002	1.293±0.001
2.00	0.5001±0.0002	1.9998±0.0009	1.580±0.001	-1.0521±0.0006	4.056±0.003	1.580±0.001
2.00	0.6000±0.0002	1.6667±0.0006	2.483±0.002	-1.2547±0.0006	4.629±0.002	2.069±0.002
2.00	0.7000±0.0002	1.4286±0.0003	4.028±0.003	-1.4345±0.0004	5.885±0.003	2.877±0.002
1.50	0.0010±0.0000	995±6	0.0015±0.0000	-0.0017±0.0001	3.7466±0.0002	1.000±0.009
1.50	0.0100±0.0000	99.9±0.3	0.0149±0.0000	-0.0342±0.0003	3.6845±0.0007	0.991±0.004
1.50	0.0500±0.0002	20.00±0.06	0.0718±0.0002	-0.1683±0.0006	3.433±0.001	0.957±0.004
1.50	0.1000±0.0002	10.00±0.02	0.1387±0.0003	-0.3302±0.0008	3.142±0.002	0.925±0.003
1.50	0.1251±0.0002	8.00±0.01	0.1711±0.0003	-0.4103±0.0009	3.003±0.002	0.912±0.002
1.50	0.1667±0.0002	6.000±0.008	0.2246±0.0003	-0.5389±0.0008	2.789±0.002	0.898±0.002
1.50	0.2000±0.0003	5.000±0.008	0.2679±0.0004	-0.640±0.001	2.630±0.002	0.893±0.002
1.50	0.3000±0.0004	3.333±0.005	0.4109±0.0007	-0.935±0.001	2.217±0.003	0.913±0.002
1.50	0.4000±0.0004	2.500±0.003	0.6037±0.0009	-1.227±0.001	1.919±0.002	1.006±0.002
1.50	0.5000±0.0003	2.000±0.001	0.914±0.001	-1.5223±0.0009	1.794±0.002	1.218±0.002
1.50	0.6000±0.0003	1.6666±0.0007	1.483±0.002	-1.822±0.001	1.988±0.002	1.647±0.002
1.50	0.7000±0.0002	1.4286±0.0004	2.577±0.002	-2.1081±0.0006	2.769±0.002	2.454±0.002
1.20	0.0010±0.0000	999±5	0.0012±0.0000	-0.0047±0.0002	2.9922±0.0004	0.998±0.008
1.20	0.0100±0.0000	100.1±0.3	0.0118±0.0000	-0.0488±0.0005	2.9192±0.0009	0.981±0.004
1.20	0.0500±0.0001	19.99±0.05	0.0548±0.0001	-0.2403±0.0009	2.607±0.002	0.913±0.003
1.20	0.0999±0.0003	10.01±0.03	0.1008±0.0003	-0.469±0.002	2.246±0.003	0.841±0.004
1.20	0.1250±0.0003	8.00±0.02	0.1214±0.0002	-0.579±0.002	2.076±0.003	0.809±0.003
1.20	0.1669±0.0005	5.99±0.02	0.1531±0.0003	-0.758±0.002	1.808±0.004	0.765±0.003
1.20	0.1998±0.0006	5.00±0.01	0.1770±0.0004	-0.892±0.003	1.615±0.005	0.738±0.003
1.20	0.2999±0.0008	3.335±0.009	0.2487±0.0005	-1.278±0.004	1.096±0.005	0.691±0.002
1.20	0.3999±0.0007	2.500±0.004	0.3417±0.0007	-1.646±0.003	0.679±0.003	0.712±0.002
1.20	0.5001±0.0005	2.000±0.002	0.505±0.001	-2.018±0.002	0.388±0.002	0.841±0.002
1.20	0.6000±0.0003	1.6667±0.0008	0.853±0.001	-2.405±0.001	0.336±0.002	1.185±0.002
1.20	0.7000±0.0002	1.4285±0.0004	1.642±0.002	-2.7957±0.0008	0.791±0.002	1.954±0.002
1.00	0.0010±0.0000	998±6	0.0010±0.0000	-0.0035±0.0002	2.4950±0.0003	0.999±0.008
1.00	0.0100±0.0000	100.2±0.4	0.0097±0.0000	-0.0661±0.0008	2.405±0.001	0.971±0.006
1.00	0.0500±0.0002	20.00±0.07	0.0431±0.0001	-0.331±0.002	2.031±0.003	0.862±0.004
1.00	0.0999±0.0004	10.01±0.04	0.0745±0.0002	-0.644±0.003	1.602±0.004	0.746±0.003
1.00	0.1252±0.0006	7.99±0.04	0.0868±0.0003	-0.797±0.004	1.396±0.005	0.693±0.004
1.00	0.1667±0.0008	6.00±0.03	0.1032±0.0003	-1.038±0.005	1.082±0.007	0.619±0.004
1.00	0.200±0.001	5.00±0.03	0.1140±0.0004	-1.215±0.008	0.86±0.01	0.571±0.004
1.00	0.301±0.002	3.32±0.02	0.1403±0.0006	-1.70±0.01	0.26±0.01	0.466±0.004
1.00	0.400±0.002	2.50±0.01	0.1700±0.0007	-2.129±0.008	-0.204±0.009	0.425±0.003
1.00	0.500±0.001	1.999±0.005	0.235±0.001	-2.551±0.005	-0.582±0.005	0.469±0.002
1.00	0.6000±0.0004	1.667±0.001	0.425±0.001	-3.007±0.002	-0.799±0.001	0.708±0.002
1.00	0.7000±0.0003	1.4286±0.0005	0.984±0.001	-3.494±0.001	-0.589±0.002	1.405±0.002
0.95	0.0010±0.0000	999±6	0.0009±0.0000	-0.0037±0.0002	2.3700±0.0003	0.998±0.008
0.95	0.0100±0.0000	100.0±0.4	0.0092±0.0000	-0.0739±0.0007	2.274±0.001	0.967±0.006
0.95	0.0500±0.0001	20.00±0.05	0.0401±0.0001	-0.364±0.002	1.882±0.002	0.845±0.003
0.95	0.1000±0.0005	10.00±0.05	0.0676±0.0002	-0.713±0.004	1.424±0.006	0.712±0.004
0.95	0.1252±0.0009	7.99±0.06	0.0777±0.0003	-0.883±0.007	1.206±0.009	0.653±0.005
0.95	0.167±0.001	5.99±0.05	0.0903±0.0003	-1.15±0.01	0.88±0.01	0.570±0.005
0.95	0.199±0.002	5.02±0.04	0.0976±0.0003	-1.34±0.01	0.64±0.01	0.516±0.004
0.95	0.301±0.004	3.32±0.04	0.1129±0.0006	-1.87±0.02	0.03±0.02	0.394±0.006
0.95	0.400±0.003	2.50±0.02	0.1289±0.0007	-2.31±0.01	-0.44±0.01	0.339±0.003
0.95	0.500±0.001	1.999±0.005	0.1689±0.0007	-2.731±0.006	-0.832±0.005	0.355±0.002
0.95	0.6000±0.0005	1.667±0.001	0.318±0.001	-3.201±0.003	-1.086±0.002	0.557±0.002
0.95	0.6999±0.0002	1.4288±0.0005	0.813±0.002	-3.717±0.001	-0.944±0.002	1.223±0.002

Continued next page

Table 4 contd.

T^*	n^*	v^*	P^*	$U_p^*/Nk_B T^*$	H^*/N	Z
0.90	0.0010±0.0000	997±5	0.0009±0.0000	-0.0041±0.0003	2.2447±0.0004	0.998±0.007
0.90	0.0100±0.0000	100.1±0.4	0.0087±0.0000	-0.081±0.001	2.144±0.001	0.963±0.005
0.90	0.0500±0.0002	20.0±0.1	0.0371±0.0001	-0.404±0.002	1.728±0.003	0.825±0.004
0.90	0.0999±0.0006	10.0±0.1	0.0605±0.0002	-0.796±0.006	1.239±0.008	0.673±0.005
0.90	0.1247±0.0009	8.0±0.1	0.0681±0.0002	-0.987±0.009	1.01±0.01	0.607±0.005
0.90	0.167±0.002	6.0±0.1	0.0766±0.0003	-1.29±0.02	0.65±0.02	0.511±0.006
0.90	0.197±0.003	5.1±0.1	0.0805±0.0003	-1.49±0.02	0.42±0.02	0.454±0.007
0.90	0.299±0.009	3.3±0.1	0.0858±0.0004	-2.07±0.04	-0.23±0.05	0.32±0.01
0.90	0.402±0.007	2.49±0.04	0.0893±0.0007	-2.53±0.03	-0.71±0.03	0.247±0.005
0.90	0.501±0.002	1.998±0.008	0.1067±0.0008	-2.945±0.009	-1.087±0.008	0.237±0.002
0.90	0.6001±0.0007	1.666±0.002	0.2117±0.0009	-3.421±0.003	-1.376±0.003	0.392±0.002
0.90	0.7001±0.0003	1.4283±0.0005	0.6430±0.0016	-3.967±0.001	-1.302±0.002	1.020±0.003
0.85	0.0010±0.0000	998±5	0.0009±0.0000	-0.0043±0.0002	2.1196±0.0004	0.998±0.007
0.85	0.0100±0.0000	100.0±0.4	0.0081±0.0000	-0.091±0.001	2.012±0.001	0.958±0.005
0.85	0.0500±0.0002	20.0±0.1	0.0340±0.0001	-0.456±0.002	1.567±0.003	0.800±0.003
0.85	0.1001±0.0008	10.0±0.1	0.0531±0.0002	-0.91±0.01	1.03±0.01	0.624±0.005
0.85	0.125±0.002	8.0±0.1	0.0581±0.0002	-1.14±0.02	0.77±0.02	0.548±0.007
0.85*	0.166±0.004	6.0±0.2	0.0618±0.0003	-1.52±0.04	0.36±0.04	0.44±0.01
0.85*	0.499±0.009	2.00±0.04	0.050±0.001	-3.21±0.03	-1.36±0.03	0.119±0.003
0.85*	0.600±0.001	1.665±0.003	0.108±0.001	-3.674±0.005	-1.668±0.004	0.212±0.002
0.85	0.7000±0.0003	1.4286±0.0006	0.470±0.002	-4.246±0.002	-1.663±0.002	0.790±0.003
0.80	0.0010±0.0000	999±6	0.0008±0.0000	-0.0053±0.0003	1.9938±0.0005	0.997±0.009
0.80	0.0100±0.0000	100.0±0.4	0.0076±0.0000	-0.102±0.001	1.881±0.001	0.953±0.005
0.80*	0.0501±0.0002	19.97±0.09	0.0308±0.0001	-0.524±0.004	1.397±0.005	0.769±0.004
0.80*	0.101±0.002	9.9±0.2	0.0448±0.0002	-1.12±0.03	0.75±0.03	0.554±0.009
0.80*	0.12±0.02	8±1	0.0430±0.0003	-1.6±0.3	0.3±0.3	0.43±0.06
0.80*	0.600±0.001	1.667±0.004	0.009±0.001	-3.965±0.007	-1.957±0.005	0.019±0.003
0.80	0.7000±0.0003	1.4285±0.0005	0.295±0.002	-4.562±0.001	-2.027±0.002	0.528±0.003

* Data points in the two-phase region, between the binodal and spinodal curves.

Table 5. Data for coexisting gas and liquid obtained with Gibbs ensemble Monte Carlo simulations.

T^*	P^*	n_{gas}^*	n_{liquid}^*	$(U/N)_{\text{gas}}^*$	$(U/N)_{\text{liquid}}^*$
0.5500	0.0021	0.0040	0.8041	0.7730	-3.6181
0.6000	0.0046	0.0083	0.7780	0.8045	-3.3484
0.6250	0.0065	0.0115	0.7640	0.8118	-3.2094
0.6500	0.0089	0.0154	0.7490	0.8131	-3.0673
0.6750	0.0119	0.0205	0.7331	0.8043	-2.9209
0.7000	0.0157	0.0270	0.7158	0.7883	-2.7695
0.7250	0.0202	0.0351	0.6972	0.7586	-2.6132
0.7500	0.0256	0.0450	0.6760	0.7203	-2.4466
0.7750	0.0324	0.0589	0.6529	0.6505	-2.2737
0.8000	0.0399	0.0753	0.6250	0.5699	-2.0828
0.8250	0.0490	0.0996	0.5910	0.4383	-1.8700
0.8500	0.0597	0.1356	0.5449	0.2410	-1.6154

Table 6. Data for coexisting solid and liquid obtained with MD simulations as described in Section 2.2.3

T^*	n_{solid}^*	n_{liquid}^*
0.6000	0.9147	0.8280
0.6500	0.9359	0.8487
0.7000	0.9462	0.8618
0.8000	0.9568	0.8842

Table 7. Data for coexisting solid and gas obtained with MD simulations as described in Section 2.2.2

T^*	n_{solid}^*	n_{gas}^*
0.4000	0.9238	0.0001
0.4500	0.9063	0.0005
0.5000	0.9138	0.0015