

УДК 538.971

## АЛГОРИТМ ДЕТЕКТИРОВАНИЯ НА АТОМНОМ УРОВНЕ ВАКАНСИОННОЙ ПОРЫ И ОПИСАНИЯ ЕЕ ФОРМЫ

А. И. Кульментьев

(Институт прикладной физики НАН Украины, г. Сумы)

Предлагается метод, позволяющий при последовательном многоуровневом моделировании детектировать появление компактных кластеров атомов с нарушенной кристаллической структурой, определять границу этого кластера, измерять его коэффициент компактности и форму. Выполнен компьютерный эксперимент, в котором имитируется процесс схлопывания сферической поры. Получены зависимости параметров формы поры от коэффициента сжатия и проведено их сравнение с аналитическими выражениями.

*Ключевые слова:* компьютерное моделирование, реакторное материаловедение, пространственно-временные уровни, вакансионные поры.

Создание реакторов деления следующего поколения невозможно без интенсивных фундаментальных и прикладных исследований. Среди них особое место занимают исследования, связанные с разработкой новых конструкционных материалов для активной зоны реактора.

Процесс разработки материала основан на выборе соответствующей матрицы, поиске оптимальных комбинаций основных компонентов и концентраций различных легирующих элементов, а также на определении режимов термомеханической обработки, позволяющих материалу сохранять в определенных пределах свои физические и механические свойства в течение всего времени эксплуатации. Успешность решения этой задачи связана с пониманием и адекватным описанием тех процессов, которые приводят к деградации рассматриваемых свойств.

Исследования радиационных повреждений твердых тел позволили сформулировать единое теоретическое описание происходящих при этом процессов. Установлено, что эволюция материала под облучением представляет многоуровневое явление, охватывающее широкий интервал пространственно-временных масштабов. Изучение его экспериментальными методами является трудной задачей, требующей длительных испытаний и значительных инвестиций.

В такой ситуации большие надежды связывают с развитием сравнительно нового направления в компьютерном материаловедении — многоуровневого моделирования [1]. Его цель состоит в том, чтобы выполнить связное описание свойств и процессов в материале в целом: от микро- до макроуровня. В основе многоуровневого моделирования лежит использование не одной, а нескольких моделей, которые в зависимости от их пространственных и временных масштабов могут быть упорядочены в виде уровней в соответствующей иерархии.

К настоящему времени в многоуровневом моделировании оформились два направления — последовательные и гибридные схемы [2].

В последовательных схемах структурный элемент модели данного уровня рассматривается в виде системы, составленной из элементов более низкого уровня. Формальное обоснование подхода состоит в рассмотрении единого гамильтониана и усреднении его по выбранной совокупности степеней свободы. В результате эти степени свободы исключаются, т. е. происходит *масштабное огрубление* системы. Например, модель самого нижнего уровня может описываться гамильтонианом, включающим все электронные степени свободы в уравнении Шредингера. В результате усреднения по всем мгновенным положениям электронов происходит переход к модели следующего уровня, в которой

корреляции в электронной подсистеме описываются в рамках формализма электронной плотности. Затем происходит усреднение по всем электронам и представление их эффективным потенциалом.

Следующий шаг состоит в выделении компактных атомных образований и описании их как единичных дефектов кристаллической структуры. Этот шаг особенно важен для компьютерного реакторного материаловедения, поскольку первичные радиационные дефекты могут формировать разнообразные вакансионные и межузельные комплексы, такие как вакансионные или газонаполненные поры и дислокационные петли.

В последовательных многоуровневых схемах актуальной является задача разработки методов, позволяющих выделять подмножество элементов данного уровня, которые образуют единый элемент следующего уровня, и описание его характеристик в рамках принятой для него модели. Целью настоящей работы является разработка метода, позволяющего решать эту задачу на атомном уровне, — выделять совокупность атомов, образующих вакансионную пору, измерять ее характеристики и предсказывать направление наиболее вероятной дальнейшей эволюции.

### Эволюция вакансионной поры

В результате облучения материалов в них образуются разнообразные первичные радиационные дефекты, которые могут объединяться в различные комплексы — вакансионные поры, дислокационные петли и примесные выделения. Предельными случаями являются сферические и плоские комплексы. В первом случае сначала в ядре простого каскада столкновений образуется маленькая группа вакансий, которая затем начинает расти за счет избыточного потока вакансий на пору. Энергия такого комплекса связана с образованием дополнительной поверхности

$$E_\nu = 4\pi R^2 \gamma, \quad (1)$$

где  $\gamma$  — коэффициент поверхностного натяжения;  $R$  — эффективный радиус поры, который определяется из условия равенства объема сферы радиусом  $R$  суммарному объему  $n_\nu$  объединившихся вакансий, каждая из которых имеет объем  $\Omega_\nu$ :

$$R = \left( \frac{3n_\nu \Omega_\nu}{4\pi} \right)^{1/3}. \quad (2)$$

В процессе эволюции сферические поры могут деформироваться и захлопываться в наиболее плотноупакованной плоскости кристалла. При этом сначала формируется диск, а затем плоские поверхности этого диска соединяются, образуя дислокационную петлю вакансионного типа. В результате приходим ко второму предельному случаю комплекса первичных радиационных дефектов, который представляет собой плоскую дислокационную петлю. Ее энергия равна [3]

$$E_l = \mu b^6 R_l \frac{6 - \nu}{6(1 - \nu)} \ln \left( \frac{4R_l}{r_0} \right) + \pi R_l^2 \gamma_d, \quad (3)$$

где  $\mu$  — модуль сдвига;  $\nu$  — коэффициент Пуассона;  $\gamma_d$  — энергия дефекта упаковки;  $R_l$  — радиус петли, определяемый из условия равенства площади круга радиусом  $R_l$  и площади плоского скопления  $n_\nu$  вакансий:

$$R_l = \Omega_\nu^{1/3} \left( \frac{n_\nu}{\pi} \right)^{1/2}.$$

Выражения (1) и (3) по-разному зависят от числа вакансий в комплексе, и можно определить некоторое критическое число вакансий  $n_{cr}$ , при котором энергии этих комплексов равны. При малом числе вакансий сферическая полость имеет меньшую энергию, чем дислокационная петля, но при  $n_\nu > n_{cr}$  сферическая полость становится менее энергетически выгодной и может схлопнуться с образованием дислокационной петли вакансионного типа.

В облучаемом материале может существовать значительный разброс в значениях  $n_{cr}$ , поскольку некоторые воздействия могут стабилизировать пору (и увеличивать значение  $n_{cr}$ ), тогда как другие

приводят к противоположному результату. Поэтому при многоуровневом моделировании необходимо на атомном уровне иметь алгоритм, который позволял бы:

- 1) детектировать формирование комплекса первичных радиационных дефектов в виде поры;
- 2) предсказывать направление ее наиболее вероятной дальнейшей эволюции.

В статье предлагается вариант такого алгоритма, основанный на анализе общих ближайших соседей, методе детектирования поверхности атомного образования [4] и методе измерения формы такого образования [5]. Разработанный алгоритм проиллюстрирован на примере компьютерного эксперимента, в котором имитируется процесс схлопывания сферической поры.

Рассмотрим сначала способ детектирования на атомном уровне вакансионной поры. Для его разработки необходимо решить две основные проблемы. Первая из них связана с тем, что методы моделирования, основанные на концепции частиц, оперируют лишь такими величинами, которые задают положения частиц и взаимодействие между ними. Поэтому необходимо из множества всех частиц выделить подмножество, которое формирует скопление. Вторая проблема связана с необходимостью измерения такой характеристики выделенного скопления, которая позволила бы однозначно классифицировать его как вакансионную пору.

### Анализ общих ближайших соседей

Традиционно анализ структуры конфигураций, формирующихся при моделировании динамической эволюции атомных систем, основывался на исследовании радиальной парной корреляционной функции  $g(r)$ . В расчетах эта функция получается в результате усреднения по всем атомам системы, и поэтому рассматриваемый метод наиболее подходит для анализа пространственно однородных систем. Трудности возникают, когда в системе есть неоднородности, например, если она состоит из нескольких твердых фаз или в ней имеются те или иные дефекты. В этом случае функция  $g(r)$  представляет собой суперпозицию парциальных вкладов, соответствующих различным пространственным областям. Существующие в неоднородных системах внутренние упругие напряжения, а также тепловые колебания атомов приводят к размытию пиков в парциальных вкладах в функцию  $g(r)$ . Как следствие, задача декомпозиции  $g(r)$  на парциальные составляющие становится плохо определенной.

В такой ситуации для выделения комплекса первичных радиационных дефектов более перспективным представляется подход, основанный на исследовании локальной кристалличности отдельного атома и выделении связанных подмножеств атомов, обладающих одинаковым типом кристалличности. Для решения этой задачи вводится представление о связанных парах атомов.

Произвольная пара атомов  $a - b$  считается связанной, если атомы достаточно близки друг к другу, т. е. расстояние  $r$  между их центрами меньше некоторого физически обоснованного значения  $r_{cut}$ . В качестве  $r_{cut}$  чаще всего выбирают радиус первого минимума функции  $g(r)$ . Заметим, что при этом речь идет не о химической, а о чисто геометрической связи.

Для атома  $a$  совокупность всех связанных с ним атомов определяет множество  $N_a$  ближайших соседей, которое можно разделить на совокупность непересекающихся подмножеств:

$$N_a = \bigcup_{\alpha} N_a^{\alpha}, \quad (4)$$

таких, что связи в пределах отдельного подмножества под действием операций точечной группы симметрии переходят друг в друга. Характеристика локальной кристалличности рассматриваемого атома может состоять в указании мощности множества  $N_a$  (числа соседей), а также типов связей в каждом из подмножеств  $N_a^{\alpha}$  и мощности этих подмножеств в разложении (4).

Ясно, что для заданной пары атомов  $a$  и  $b$  тип связи  $a - b$  определяется структурой ее окружения. В [6] было показано, что дееспособную схему характеристики связи  $a - b$  можно развить на основе анализа не всей структуры окружения пары, а лишь используя множество

$$N_{ab} = N_a \cap N_b$$

общих ближайших соседей атомов  $a$  и  $b$ . Соответственно разработанный метод получил название метода анализа общих ближайших соседей (CNA — Common Neighbor Analysis). В этом методе заданная связь характеризуется тройкой целочисленных параметров  $ijk$ , где  $i$  — мощность множества  $N_{ab}$  (число общих ближайших соседей);  $j$  — число связей между атомами множества  $N_{ab}$ ;  $k$  — длина наибольшей непрерывной цепочки, которую можно составить из этих  $j$  связей.

На рис. 1 (см. также цветную вкладку) показан пример применения CNA-метода для описания локальной кристалличности атома в ГЦК-решетке. Произвольный атом в этой решетке имеет 12 ближайших соседей (рис. 1,  $a$ ), и с каждым из них он делит четырех общих ближайших соседей ( $i = 4$ ), из которых можно сформировать две связи ( $j = 2$ ) (рис. 1,  $b$ ). Поскольку длина самой длинной цепочки, которую можно составить из этих двух связей, равна единице, то  $k = 1$ , и окончательно локальная кристалличность произвольного атома в ГЦК-решетке задается в виде  $12 \times 421$ .

Схема типизации связи в CNA-методе основана лишь на анализе общих ближайших соседей пары атомов и поэтому позволяет определять эквивалентные связи в разложении (4) без применения группового симметричного анализа. Как следствие, ее можно использовать для описания локальной кристалличности в областях с нарушенной точечной симметрией, например, для атомов, входящих в состав структурных дефектов, или при наличии случайных смещений атомов из симметричных равновесных положений. Подробная таблица характеристик локальной кристалличности атомов в различных решетках и для некоторых дефектов приведена в [6]. Достоинством CNA-метода является его сравнительная простота, а использование лишь целочисленных параметров делает его устойчивым относительно небольших случайных смещений атомов.

Применение CNA-метода при моделировании динамической эволюции атомной системы позволяет детектировать появление атомов, локальная кристалличность которых отличается от той, которая характерна для исходной решетки. Образование даже одиночного структурного дефекта будет приводить к возникновению компактного кластера атомов с дефектной кристалличностью, формирующих атомную *поверхность* такого дефекта. Разделение структурных дефектов по признаку вакансионного или межузельного типа можно провести на основании измерения атомной плотности в пределах этого образования. С этой целью рассмотрим сначала метод идентификации атомов, лежащих на поверхности атомного кластера.

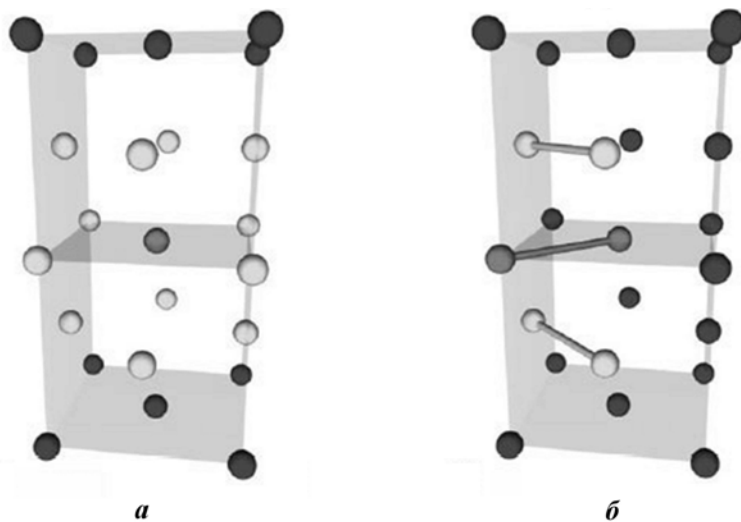


Рис. 1. Иллюстрация CNA-метода для ГЦК-решетки:  $a$  — атом, для которого определяется тип кристалличности (в центре, выделен темно-серым цветом), и атомы, формирующие множество его ближайших соседей (светло-серого цвета);  $b$  — связь атома с одним из его ближайших соседей (выделена темно-серым цветом), а также множество общих ближайших соседей и две связи между ними (светло-серого цвета)

### Метод идентификации атомов поверхности компактного кластера

Рассмотрим гладкую поверхность, ограничивающую некоторую замкнутую область  $\Omega$  и пробную сферу радиусом  $R_s$ . При произвольном положении центра пробной сферы пересечение пробной сферы и области  $\Omega$  может быть пустым, содержать одну точку или континуум точек. В первом случае сфера находится целиком вне области  $\Omega$ , во втором — касается поверхности  $\Omega$  в единственной точке, в третьем — содержит внутренние точки области  $\Omega$ . Отсюда следует, что поверхность можно представить в виде объединения одноточечных множеств, соответствующих всем возможным положениям пробной сферы. При этом важно, что для каждого одноточечного множества существует взаимно однозначное соответствие между точкой поверхности и положением центра пробной сферы. Поэтому рассмотрим множество положений центра пробной сферы, которая катится по поверхности.

Для дискретного описания гладкой поверхности ее нужно разделить на совокупность достаточно малых полигонов простой формы, таких что каждый полигон представляет алгебраическую поверхность малой степени. При этом всегда существует проблема выбора размера, формы, ориентации отдельных полигонов и гладкого сшивания соседних полигонов в единое целое. Если же поверхность определяется конечным числом атомов и каждый атом представляет сферу радиусом  $R_a$ , то весь континуум  $S$  положений центра пробной сферы можно представить в виде  $S = S_1 \supset S_2 \supset S_3 \supset \dots$ , где  $S_i$  — множество положений пробной сферы, в которых она касается одновременно  $i$  атомов поверхности (при этом  $S_1 \equiv S$ ). Легко видеть, что множества  $S_1$  и  $S_2$  имеют мощность континуума, а множество  $S_3$  конечно, и это обстоятельство может быть использовано для дискретизации рассматриваемой поверхности.

В соответствии с этим определим такое фиксированное положение пробной сферы, при котором она находится в одновременном контакте с тремя (а в общем случае и более чем с тремя) атомами и не перекрывается ни с одним другим атомом (рис. 2, *a*). Ясно, что с динамической точки зрения в этом случае сфера не может катиться дальше без потери контакта по крайней мере с одним из атомов. Центры этих атомов формируют вершины треугольника — элемента так называемой  $r$ -редуцированной поверхности.

Если первый элемент поверхности задан, то второй элемент можно определить, перекачивая пробную сферу через любое из его ребер (сторон треугольника) так, чтобы она сохраняла контакт с двумя из атомов ( $A$  и  $B$  на рис. 2, *b*), пока сфера не коснется третьего атома следующего элемента поверхности ( $D$  на рис. 2, *b*). При этом важно, что любое из ребер  $r$ -редуцированной поверхности является общим ребром двух смежных треугольных элементов.

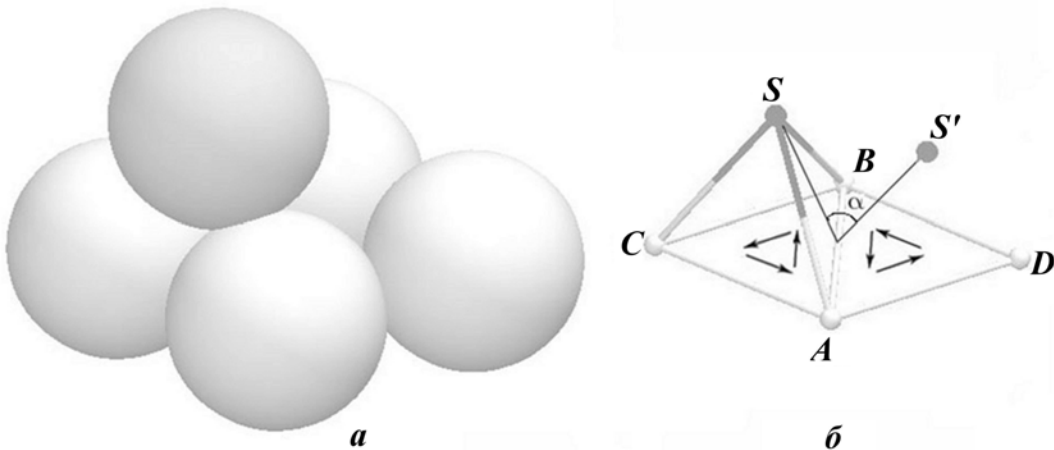


Рис. 2. Фиксированное положение пробной сферы (сверху, затемнена) с центром в точке  $S$ , при котором она одновременно касается трех атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$  поверхности (*a*) и иллюстрация перехода от данного к следующему фиксированному положению пробной сферы (*b*)

Таким образом, частичный характер рассматриваемой системы приводит к естественной дискретизации  $r$ -редуцированной поверхности, а последовательное перекачивание пробной сферы через неисследованные ребра обеспечивает связывание всех треугольных элементов поверхности в единое целое.

Для кластера первый шаг состоит в расчете радиуса-вектора  $\mathbf{R}_C$  его центра масс и минимального расстояния  $r_{\min}$  между частицами кластера. В расчетах радиус атома  $R_a$  определен в виде  $r_{\min}/2$ , а радиус пробной сферы  $R_s = \alpha R_a$ , где для представленных ниже результатов использовалось значение  $\alpha = 1$ . Как видно из рис. 2, для фиксированного положения пробной сферы расстояние между ее центром и центром любого из атомов равно  $R_{tot} = R_a + R_s$ . Затем пробная сфера размещается вне кластера в начальной точке  $S_0$  с радиусом-вектором  $\mathbf{r}_0$ . Вектор  $\mathbf{d} = \mathbf{R}_C - \mathbf{r}_0$  задает направление движения сферы к кластеру.

Следующий шаг состоит в определении первого фиксированного положения пробной сферы. Этой задаче можно придать динамическую интерпретацию. Для этого будем считать, что пробная сфера из точки  $\mathbf{r}_0$  начинает движение с некоторой скоростью в направлении  $\mathbf{d}$ . Положения всех остальных атомов известны и фиксированы. Тогда первый атом на пути пробной сферы — это атом, для которого время  $t_i$  до столкновения будет минимальным. Таким образом, для каждого атома кластера задача распадается на две: 1) проверка возможности столкновения с пробной сферой; 2) оценка времени до столкновения. Используемые при этом алгоритмы характерны для модели твердых сфер [7]. Атомы кластера, успешно прошедшие указанную проверку, образуют подмножество, в котором каждому атому соответствует конечное значение  $t_i$ .

Упорядочиваем это подмножество в порядке возрастания значения  $t_i$ , а затем выбираем первый атом  $A$  из полученного списка и проверяем, входит ли он в первый полигон, т. е. можно ли определить первое фиксированное положение пробной сферы. Из рис. 2, 3 видно: для того чтобы атом  $A$  входил в первый полигон, он должен иметь по меньшей мере двух ближайших соседей, расположенных на расстоянии меньше чем  $2R_{tot}$ . Это следует из неравенства треугольника. Очевидно, что такое же неравенство должно выполняться и для расстояния между атомами  $B$  и  $C$ . В соответствии с этим отыскивается первая тройка атомов кластера  $\{A, B, C\}$ , для которых эти ограничения выполняются, и рассчитывается определяемое ими фиксированное положение пробной сферы (рис. 3).

В рассматриваемом методе поверхность представляется в виде объединения полигонов (в простейшем случае треугольников). Для того чтобы определить отдельный полигон, необходимо указать его вершины и ребра. Кроме того, нужно задать ориентацию полигона. Это можно сделать, если задать последовательность обхода вершин. В этом случае внешние ребра полигона определяются однозначно. Для определенности в расчетах принимается, что возможный кандидат в элементы поверхности ориентирован по направлению к  $S_0$ , т. е.  $\overrightarrow{AS_0} \cdot (\overrightarrow{AB} \times \overrightarrow{AC}) > 0$ . Если это условие не выполняется, то атомы  $B$  и  $C$  меняются местами.

Затем для тройки атомов  $A, B, C$  рассчитываются координаты фиксированного положения центра пробной сферы  $\mathbf{r}_S$ . Для этого используется эффективный алгоритм, основанный на геометрических построениях и операциях линейной алгебры. Три точки  $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_C$  однозначно определяют плоскость

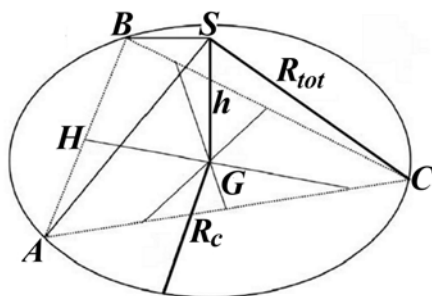


Рис. 3. Иллюстрация процедуры определения фиксированного положения  $S$  пробной сферы, при котором она одновременно касается трех атомов —  $A, B$  и  $C$

и лежащую в этой плоскости окружность, описанную вокруг треугольника  $ABC$ . Центр сферы  $\mathbf{r}_S$  в фиксированном положении расположен на прямой, перпендикулярной этой плоскости и проходящей через центр  $\mathbf{r}_G$  окружности.

Инструментальный метод построения центра  $\mathbf{r}_G$  состоит в том, что он совпадает с точкой пересечения перпендикуляров, восстановленных к серединам сторон треугольника  $ABC$ . Поэтому радиус-вектор центра описанной окружности равен сумме двух векторов: радиуса-вектора середины стороны  $AB$  (точка  $H$ )  $\mathbf{r}_H = (\mathbf{r}_A + \mathbf{r}_B)/2$  и вектора  $\overrightarrow{HG}$ . Очевидно,

$$HG = \sqrt{R_c^2 - \frac{1}{4} |\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A|^2},$$

где  $R_c$  — радиус описанной окружности, который можно рассчитать, используя следующее выражение, вытекающее из теоремы синусов:

$$R_c = \frac{|\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_C| \cdot |\mathbf{r}_C - \mathbf{r}_A| \cdot |\mathbf{r}_A - \mathbf{r}_B|}{2 |(\mathbf{r}_B - \mathbf{r}_A) \times (\mathbf{r}_C - \mathbf{r}_A)|} = \frac{r_{BC} r_{CA} r_{AB}}{2 |\mathbf{r}_{BA} \times \mathbf{r}_{CA}|}.$$

Затем определяются орты  $\hat{\mathbf{r}}_{AB}$  и  $\hat{\mathbf{r}}_{AC}$  двух непараллельных векторов  $\mathbf{r}_{AB}$  и  $\mathbf{r}_{AC}$  и единичный вектор  $\mathbf{n}$ , нормальный к стороне  $AB$ :

$$\mathbf{n} = \frac{\mathbf{r}_{AC} - \hat{\mathbf{r}}_{AB} (\mathbf{r}_{AC} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{AB})}{|\mathbf{r}_{AC} - \hat{\mathbf{r}}_{AB} (\mathbf{r}_{AC} \cdot \hat{\mathbf{r}}_{AB})|}.$$

Тогда  $\mathbf{r}_G = \mathbf{r}_H + k \cdot HG \cdot \mathbf{n}$ , где  $k$  — коэффициент, который в зависимости от угла при вершине  $C$  может принимать значения  $-1$  (угол тупой),  $0$  (угол прямой) или  $+1$  (угол острый).

После нахождения  $\mathbf{r}_G$  рассчитывается радиус-вектор фиксированного положения центра пробной сферы. Из рис. 3 видно, что

$$\mathbf{r}_S = \mathbf{r}_G + \sqrt{R_{tot}^2 - R_c^2} \frac{\mathbf{r}_{AB} \times \mathbf{r}_{AC}}{|\mathbf{r}_{AB} \times \mathbf{r}_{AC}|}.$$

Заметим, что при таком подходе ориентация полигона относительно пробной сферы в ее исходном и первом фиксированном положениях одна и та же. Окончательное включение первого полигона в список, определяющий поверхность кластера в целом, происходит после успешной проверки того, что внутри пробной сферы в положении  $\mathbf{r}_S$  нет ни одного атома кластера.

Следующий шаг состоит в последовательном определении остальных полигонов поверхности кластера. Каждый полигон однозначно соответствует фиксированному положению пробной сферы, при котором она находится в одновременном контакте с атомами в вершинах полигона. В соответствии с этим отдельный полигон задается в виде объекта данных производного типа, который включает в себя упорядоченный список номеров вершин, координаты фиксированного положения центра пробной сферы и связанный с каждой из сторон полигона признак обработки. Последний параметр необходим для указания того, происходило уже перекачивание пробной сферы через данную сторону или нет.

Сначала среди всех уже найденных полигонов поверхности отыскивается первый, в котором хотя бы одна из сторон не обработана, и определяется соседний полигон, отвечающий пробной сфере, перекатившейся через данную сторону (сторона  $AB$  на рис. 2, б). Для этого выделяются все атомы, с которыми может прийти в контакт пробная сфера, т. е. атомы, удаленные на расстояние, меньшее  $2R_{tot}$ , как от атома  $A$ , так и от атома  $B$ . Для каждого из таких атомов  $D$  рассчитываются координаты фиксированного положения пробной сферы.

Затем из всех рассматриваемых атомов выбирается первый, с которым придет в контакт пробная сфера. Из рис. 2, б видно, что каждый из таких атомов можно характеризовать углом поворота  $\alpha$ ,  $\alpha \in [0, 2\pi)$ , и для искомого атома этот угол минимален. Поэтому если  $H$  — середина стороны  $AB$ , а  $S$  и  $S'$  — соответственно положения исходной сферы и сферы после поворота, то

$$\cos \alpha = \frac{\overrightarrow{HS} \cdot \overrightarrow{HS'}}{HS \cdot HS'}; \quad \sin \alpha = \frac{(\overrightarrow{HS} \times \overrightarrow{HS'}) \cdot \overrightarrow{AB}}{HS \cdot HS' \cdot AB}.$$

Эти два соотношения позволяют восстановить истинное значение угла  $\alpha$  в интервале  $[0, 2\pi)$ .

Определенный полигон поверхности заносится в общий список лишь после того, как проверено, что он не совпадает ни с одним из ранее найденных полигонов. Для уменьшения влияния ошибок округления сравниваются не координаты фиксированных положений сферы, а упорядоченные списки целочисленных номеров атомов — вершин полигонов. Процесс определения поверхности завершается тогда, когда в списке больше нет ни одной необработанной стороны.

Пусть в результате применения описанной процедуры к компактному кластеру дефектных атомов определена его  $r$ -редуцированная поверхность  $\Gamma$ , которая представляет объединение  $n$  треугольных полигонов:

$$\Gamma = \bigcup_{i=1}^n \Delta A_i B_i C_i = \bigcup_{i=1}^n \Gamma_i, \quad (5)$$

где  $A_i, B_i, C_i$  — вершины  $i$ -го полигона, совпадающие с центрами атомов поверхности и упорядоченные так, что направление обхода  $A_i \rightarrow B_i \rightarrow C_i$  определяет внешнюю нормаль. Как следствие, для каждого полигона можно рассчитать нормированный вектор внешней нормали

$$\mathbf{n}_i = \frac{\overrightarrow{A_i B_i} \times \overrightarrow{A_i C_i}}{|\overrightarrow{A_i B_i} \times \overrightarrow{A_i C_i}|}.$$

Будем в дальнейшем моделировать дефектный кластер полиэдром с внешней границей  $\Gamma$ . Следующий шаг состоит в разделении структурных дефектов по признаку вакансионного или межузельного типа. Это можно сделать на основе измерения коэффициента компактности [8].

### Процедура измерения коэффициента компактности атомного кластера

Если, как и выше, моделировать атомы твердыми сферами с радиусами  $R_a$ , то для оценки коэффициента компактности нужно измерить объем полиэдра и суммарный объем всех твердых сфер, как целиком, так и частично заключенных внутри этого полиэдра.

Объем  $V$  полиэдра можно представить в виде суммы по всем полигонам объемов пирамид с этими полигонами в основании и вершиной, расположенной в произвольной фиксированной точке  $P$ . Очевидно, что объем пирамиды для  $i$ -го полигона можно представить в виде

$$V_i = \frac{1}{6} \overrightarrow{A_i P} \cdot (\overrightarrow{A_i B_i} \times \overrightarrow{B_i C_i}).$$

В расчетах в качестве точки  $P$  выбирался центр масс кластера.

Затем перебираются атомы поверхности дефектного кластера и для каждого из них измеряется доля  $V_{in}$  его объема, которая попадает внутрь полиэдра. Для этого сначала рассчитывается площадь  $S_{in}$  той части поверхности атома, которая лежит внутри полиэдра. Очевидно,

$$V_{in} = \frac{4}{3} \pi R_a^3 \cdot \frac{S_{in}}{4\pi R_a^2} = \frac{R_a S_{in}}{3}.$$

В общем случае, кроме атомов поверхности, дефектный кластер может включать и атомы, которые целиком лежат внутри полиэдра. Для определения таких атомов перебираются остальные атомы системы и для каждого из них вычисляется значение индикаторной функции

$$D(\mathbf{r}) = \begin{cases} 1 & \text{для } \mathbf{r} \text{ внутри полиэдра;} \\ 0 & \text{для } \mathbf{r} \text{ снаружи полиэдра.} \end{cases} \quad (6)$$

Алгоритм расчета функции  $D(\mathbf{r})$  подробно изложен в [5].

Если обнаруживаются атомы, для которых  $D(\mathbf{r}) = 1$ , то их объем прибавляется к сумме по атомам поверхности долей объемов всех атомов, которые лежат внутри полиэдра. Коэффициент компактности представляет собой отношение суммарного объема к объему полиэдра.



## Измерение параметров формы атомного образования

Одной из обязательных характеристик атомного образования является его форма. Так, экспериментальные исследования наглядно свидетельствуют о большом разнообразии форм, которые могут иметь поры в облученных металлах. Причиной этого является сильная зависимость поверхностной энергии в кристалле от кристаллографического направления. Для некоторых сингоний различия ее значений в зависимости от ориентации могут превышать 50 % [9]. Поэтому после того, как на атомном уровне детектировано образование структурного дефекта, определена атомная *поверхность* этого дефекта и выяснено, какой это дефект, естественно в качестве следующего шага измерить параметры формы поры.

Согласно определению [10] "форма объекта — это та геометрическая информация, которая остается после отделения от объекта всего, что связано с возможными изменениями его масштаба, перемещениями и поворотами в пространстве". Различают задачи представления и описания формы. При этом под представлением понимают выбор формализма для характеристики форм. Описание является следующим шагом и подразумевает задание численного дескриптора для конкретного объекта. Дескриптор часто выбирается в виде характеристического вектора.

В настоящее время широкое распространение получили методы, в которых для представления формы используют геометрические моменты. Для произвольного объекта, ограниченного замкнутой поверхностью, его геометрические моменты определяются следующим образом:

$$m_{p_1 p_2 p_3} = \iiint x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3} D(\mathbf{r}) d\mathbf{r}, \quad (7)$$

где  $D(\mathbf{r})$  — индикаторная функция объекта, определяемая аналогично (6);  $(p_1, p_2, p_3)$  — тройка неотрицательных целых чисел,  $p_1 + p_2 + p_3$  — порядок момента; интегрирование проводится по всему пространству. К моментам самых низких порядков относятся объем объекта  $V = m_{000}$  и три момента  $m_{100}$ ,  $m_{010}$ ,  $m_{001}$ , которые позволяют рассчитать координаты его центра масс:

$$\bar{x} = \frac{m_{100}}{m_{000}}, \quad \bar{y} = \frac{m_{010}}{m_{000}}, \quad \bar{z} = \frac{m_{001}}{m_{000}}.$$

Совокупность всех моментов (7) однозначно определяет индикаторную функцию. Частичное, хотя и достаточно точное описание формы объекта можно получить на основе конечного подмножества моментов  $\{m_{p_1 p_2 p_3}\}$ , из которых необходимо сформировать компоненты характеристического вектора. При этом в соответствии с данным выше определением нужно следить, чтобы каждая компонента вектора была инвариантной относительно перемещения объекта, изменения его масштаба или поворота как целого в пространстве.

Для удовлетворения первому условию достаточно перейти к центральным моментам

$$M_{p_1 p_2 p_3} = \iiint (x - \bar{x})^{p_1} (y - \bar{y})^{p_2} (z - \bar{z})^{p_3} D(\mathbf{r}) d\mathbf{r}.$$

Столь же просто достигается и масштабная инвариантность — в результате изометрического масштабирования центральных моментов:

$$\mu_{p_1 p_2 p_3} = \frac{M_{p_1 p_2 p_3}}{V^\gamma}, \quad \gamma = \frac{p_1 + p_2 + p_3}{3} + 1. \quad (8)$$

Сложнее достичь инвариантности компонент характеристического вектора относительно вращений. Первый систематический подход к достижению такой инвариантности был предложен в 1989 г. [11] и основывался на теории групп и тензорном исчислении. В [12] был предложен метод описания формы, в котором используются лишь моменты второго порядка и их инварианты:

$$O_1 = M_{200} + M_{020} + M_{002};$$

$$O_2 = M_{200}M_{020} + M_{200}M_{002} + M_{020}M_{002} - M_{110}^2 - M_{101}^2 - M_{011}^2;$$

$$O_3 = M_{200}M_{020}M_{002} + 2M_{110}M_{101}M_{011} - M_{200}M_{011}^2 - M_{020}M_{101}^2 - M_{002}M_{110}^2.$$

В соответствии с (8) для достижений масштабной инвариантности инвариант  $O_1$  нужно поделить на  $V^{5/3}$ ,  $O_2$  — на  $V^{10/3}$ ,  $O_3$  — на  $V^{15/3} = V^5$ . Поэтому в [12] в качестве дескриптора формы использовался характеристический вектор с тремя компонентами:

$$\Omega_1 = \frac{V^{5/3}}{O_1}; \quad \Omega_2 = \frac{V^{10/3}}{O_2}; \quad \Omega_3 = \frac{V^5}{O_3}. \quad (9)$$

Для ряда трехмерных объектов (тетраэдр, куб, октаэдр, эллипсоид, и т. п.) можно получить аналитические выражения компонент (9) и показать, что они имеют максимальные значения для сферы ( $\Omega_1^S, \Omega_2^S, \Omega_3^S$ ). Последний шаг состоит во введении нормированных компонент

$$\bar{\Omega}_1 = \frac{\Omega_1}{\Omega_1^S}; \quad \bar{\Omega}_2 = \frac{\Omega_2}{\Omega_2^S}; \quad \bar{\Omega}_3 = \frac{\Omega_3}{\Omega_3^S}, \quad (10)$$

которые изменяются в интервале от 0 до 1.

Таким образом, в предлагаемом подходе форма поры будет описываться характеристическим вектором  $(\bar{\Omega}_1, \bar{\Omega}_2, \bar{\Omega}_3)$  (10), и измерение отдельных компонент этого вектора связано с вычислением трехмерных интегралов (7). Особая форма области интегрирования — полиэдр, ограниченный поверхностью  $\Gamma$  (5), и вид подынтегральной функции позволяют получить очень эффективную схему расчета точных значений геометрических моментов (7).

Эта схема основана на использовании теоремы Остроградского—Гаусса, согласно которой вычисление объемного интеграла от некоторого скалярного поля  $f(\mathbf{r})$  сводится к вычислению потока через границу этого объема векторного поля  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$ , такого что  $\text{div } \mathbf{F}(\mathbf{r}) = f(\mathbf{r})$ , т. е.

$$\int_{\Omega} f(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\Omega} \text{div } \mathbf{F}(\mathbf{r}) d\mathbf{r} = \int_{\Gamma} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} ds.$$

Для скалярного поля  $f(\mathbf{r}) = x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}$  искомое поле  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  определяется сравнительно просто:

$$\mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}}{3} \left( \frac{x}{p_1 + 1}, \frac{y}{p_2 + 1}, \frac{z}{p_3 + 1} \right).$$

Поток векторного поля  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  через границу полиэдра  $\Gamma$  (5), очевидно, равен сумме потоков этого поля через отдельные полигоны, т. е.

$$\int_{\Gamma} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n} ds = \sum_{i=1}^n \int_{\Gamma_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_i ds.$$

Поскольку вектор внешней нормали  $\mathbf{n}_i$  постоянен в пределах  $i$ -го полигона  $\Gamma_i$ , то

$$\begin{aligned} \int_{\Gamma_i} \mathbf{F} \cdot \mathbf{n}_i ds &= \int_{\Gamma_i} \frac{x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}}{3} \left( \frac{x n_{ix}}{p_1 + 1} + \frac{y n_{iy}}{p_2 + 1} + \frac{z n_{iz}}{p_3 + 1} \right) ds = \\ &= \frac{n_{ix}}{3(p_1 + 1)} \int_{\Gamma_i} x^{p_1+1} y^{p_2} z^{p_3} ds + \frac{n_{iy}}{3(p_2 + 1)} \int_{\Gamma_i} x^{p_1} y^{p_2+1} z^{p_3} ds + \frac{n_{iz}}{3(p_3 + 1)} \int_{\Gamma_i} x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3+1} ds. \end{aligned}$$

При вычислении интегралов, входящих в последнее соотношение, существенного упрощения можно достичь в результате перехода к естественным координатам  $(L_1, L_2, L_3)$ . В основе этого упрощения лежит следующее интегральное соотношение [13]:

$$\int_{\Gamma} L_1^k L_2^l L_3^m ds = 2S \frac{k! l! m!}{(k + l + m + 2)!},$$

где  $S$  — площадь полигона; для удобства обозначений индекс полигона в этом и последующих выражениях опущен. Использование этого соотношения и формулы бинома Ньютона позволяет получить следующее точное выражение для вклада в момент (7) от потока поля  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  через полигон с вершинами в точках  $(x_1, y_1, z_1)$ ,  $(x_2, y_2, z_2)$  и  $(x_3, y_3, z_3)$ :

$$\begin{aligned}
 m_{p_1 p_2 p_3} &= \int_{\Gamma} \frac{x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}}{3} \left( \frac{x n_x}{p_1 + 1} + \frac{y n_y}{p_2 + 1} + \frac{z n_z}{p_3 + 1} \right) d\sigma = \\
 &= \frac{2S}{3(P+3)!} \sum_{k_1=0}^{p_1} \sum_{k_2=0}^{p_2} \sum_{k_3=0}^{p_3} \binom{p_1}{k_1} \binom{p_2}{k_2} \binom{p_3}{k_3} x_3^{p_1-k_1} y_3^{p_2-k_2} z_3^{p_3-k_3} (P-K)! \times \\
 &\times \sum_{j_1=0}^{k_1} \sum_{j_2=0}^{k_2} \sum_{j_3=0}^{k_3} \binom{k_1}{j_1} \binom{k_2}{j_2} \binom{k_3}{j_3} x_1^{j_1} y_1^{j_2} z_1^{j_3} x_2^{k_1-j_1} y_2^{k_2-j_2} z_2^{k_3-j_3} J!(K-J)! \times \\
 &\times [\varphi_1 + \varphi_2 + \varphi_3 + (\varphi_1 - \varphi_2)J + (\varphi_2 - \varphi_3)K + \varphi_3 P], \\
 \varphi_i &= \frac{n_x x_i}{p_1 + 1} + \frac{n_y y_i}{p_2 + 1} + \frac{n_z z_i}{p_3 + 1}, \quad P = \sum_{i=1}^3 p_i, \quad J = \sum_{i=1}^3 j_i, \quad K = \sum_{i=1}^3 k_i.
 \end{aligned}$$

### Компьютерный эксперимент и детали алгоритмов

Применим разработанный подход к компьютерному эксперименту, в котором имитируется процесс схлопывания сферической поры. Пусть в начальном состоянии в ГЦК-решетке существует сферическая пора радиусом  $R$ , образовавшаяся в результате слияния  $n_\nu$  вакансий. Будем считать, что объем  $\Omega_\nu$  каждой вакансии равен объему  $\Omega_{at}$ , приходящемуся на один атом, т. е.  $\Omega_\nu = \Omega_{at} = a_{lat}^3/4$ , где  $a_{lat}$  — параметр решетки. Тогда радиус поры определяется выражением (2):

$$R = \left( \frac{3n_\nu \Omega_\nu}{4\pi} \right)^{1/3} = a_{lat} \left( \frac{3}{16\pi} n_\nu \right)^{1/3}. \quad (11)$$

Совместим центр сферы радиусом  $R$  с одним из узлов решетки и удалим из расчетной ячейки все атомы, центры которых попадают внутрь этой сферы. В результате получаем атомную модель сферической вакансионной поры. Определим с помощью СНА-метода локальную кристалличность всех атомов в расчетной ячейке и разделим их на два непересекающихся подмножества: атомы, локальная кристалличность которых соответствует совершенной решетке, и дефектные атомы. В рамках описанного выше метода определим атомы, которые образуют внешнюю границу компактного комплекса дефектов, тип комплекса, а затем измерим параметры его формы.

Для моделирования процесса схлопывания поры многократно повторим описанный эксперимент, но теперь в исходном состоянии будем удалять из расчетной ячейки атомы, лежащие не внутри сферы, а внутри равного ей по объему эллипсоида вращения. Такой эллипсоид можно рассматривать как результат *сжатия* сферической поры. Если главные оси эллипсоида совпадают с кристаллографическими осями, то его каноническое уравнение можно записать в виде

$$\frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} = 1,$$

где  $a$  и  $b$  — полуоси эллипса, в результате вращения которого вокруг малой оси, совпадающей с осью сжатия поры, получается эллипсоид вращения. Определим коэффициент сжатия  $\xi$  в виде

$$\xi = 1 - \frac{b}{a}. \quad (12)$$

Очевидно, что для исходной сферической поры  $\xi = 0$ , а в пределе схлопнутой поры  $\xi \rightarrow 1$ .

Обозначим через  $V_0 = n_\nu \Omega_\nu$  объем сферической поры. Из (12) следует, что  $b = a(1 - \xi)$ . Приравняв объем эллипсоида вращения

$$V = \frac{4}{3}\pi a^2 b = \frac{4}{3}\pi a^3 (1 - \xi) \quad (13)$$

объему  $V_0$ , получаем для заданного значения  $\xi$  следующие выражения для полуосей  $a$  и  $b$ :

$$a = \left( \frac{3}{4\pi} V_0 \right)^{1/3} \frac{1}{(1 - \xi)^{1/3}}; \quad b = \left( \frac{3}{4\pi} V_0 \right)^{1/3} (1 - \xi)^{2/3}. \quad (14)$$

Введем вспомогательную функцию

$$f(x, y, z) = \frac{x^2}{a^2} + \frac{y^2}{a^2} + \frac{z^2}{b^2} - 1,$$

где полуоси  $a$  и  $b$  определяются (14). Для точек  $\mathbf{r}$  внутри эллипсоида вращения  $f(\mathbf{r}) < 0$ , на его поверхности  $f(\mathbf{r}) = 0$ , вне эллипсоида  $f(\mathbf{r}) > 0$ . Перебираем все атомы в расчетной ячейке, вычисляем для каждого из них значение функции  $f(\mathbf{r})$  и удаляем те, для которых эта функция отрицательна. Таким путем подготавливается атомная конфигурация, соответствующая сжатой поре.

Повторим описываемый эксперимент для ряда значений коэффициента сжатия  $\xi$ , и для каждого  $\xi$  измерим параметры формы поры.

### Результаты компьютерного эксперимента и обсуждение

В соответствии с описанным выше алгоритмом в эксперименте расчетная ячейка выбиралась в виде фрагмента ГЦК-решетки размером  $15 \times 15 \times 15$  (в единицах параметра решетки  $a_{lat}$ ). Для моделирования тепловых колебаний каждый атом случайным образом смещался из положения равновесия. При этом для каждой из прямоугольных декартовых координат  $x$ ,  $y$  и  $z$  использовалась равномерная функция распределения с амплитудой, равной  $0,05a_{lat}$ .

В эксперименте рассматривалась пора, образовавшаяся в результате слияния  $n_\nu = 400$  вакансий. Рассчитанный по формуле (11) эффективный радиус сферической поры (коэффициент сжатия  $\xi = 0$ ) был равен  $2,88a_{lat}$ , а число атомов, для которых  $f(\mathbf{r}) < 0$ , равнялось 381. Эти атомы удалялись из расчетной ячейки, а для всех оставшихся выполнялся анализ их локальной кристалличности.

В результате этого анализа в расчетной ячейке было выделено 306 дефектных атомов, т. е. для каждого из которых число его ближайших соседей отличалось от 12: 24 атома с 6 ближайшими соседями; 30 с 8; 120 с 9; 72 с 10 и 60 с 11. Эти 306 атомов формируют дефектный кластер, для которого определялась внешняя граница.

На рис. 4 показаны поперечные сечения расчетных ячеек плоскостью, проходящей через центр поры и совпадающей с одной из координатных плоскостей (в данном случае с плоскостью  $xz$ ), для двух значений коэффициента сжатия (12). Измеренный описанным выше способом коэффициент компактности кластера дефектных атомов оказался равным  $0,1207$ . Сравнение его с соответствующим коэффициентом в исходном бездефектном кристалле (который равен  $0,7405$  [8]) позволяет однозначно классифицировать рассматриваемое дефектное образование как вакансионную пору.

На рис. 5 (см. также цветную вкладку) показано, как при сжатии поры меняются параметры ее формы. Для эллипсоида, главные оси которого совпадают с кристаллографическими осями, а полуоси равны  $(a, a, a(1 - \xi))$ , можно получить аналитические выражения для моментов второго порядка:

$$\mu_{200} = a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi); \quad \mu_{020} = a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi); \quad \mu_{002} = a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi)^2,$$

а объем определяется формулой (13). Следовательно,

$$\Omega_1 = \left( \frac{2000\pi^2}{9} \right)^{1/3} \frac{3(1 - \xi)^{2/3}}{2 + (1 - \xi)^2} = \Omega_1^S \frac{3(1 - \xi)^{2/3}}{2 + (1 - \xi)^2};$$

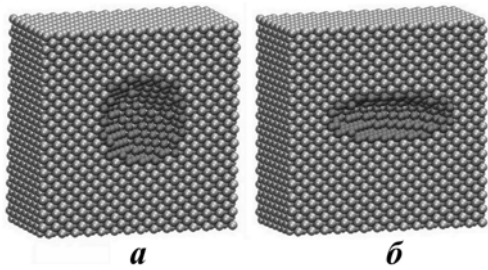


Рис. 4. Вид в разрезе расчетной ячейки с выделением атомов с дефектной локальной кристаллическостью (в центре) для двух значений коэффициента сжатия:  $\xi = 0$  (а) и  $\xi = 0,7$  (б)

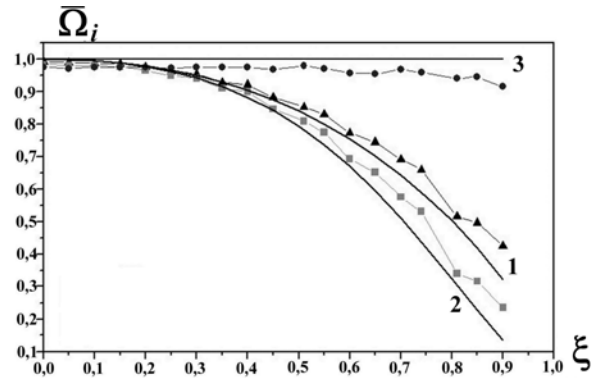


Рис. 5. Зависимость параметров формы поры от коэффициента сжатия  $\xi$ : 1 —  $\bar{\Omega}_1$ ; 2 —  $\bar{\Omega}_2$ ; 3 —  $\bar{\Omega}_3$ ;  $\blacktriangle$ ,  $\blacksquare$ ,  $\bullet$  — результаты компьютерного эксперимента; — — — аналитические зависимости (15)

$$\Omega_2 = \left( \frac{2000\pi^2}{9} \right)^{2/3} \frac{3(1-\xi)^{4/3}}{1+2(1-\xi)^2} = \Omega_2^S \frac{3(1-\xi)^{4/3}}{1+2(1-\xi)^2};$$

$$\Omega_3 = \frac{2000\pi^2}{9} = \Omega_3^S;$$

$$\bar{\Omega}_1 \equiv \frac{\Omega_1}{\Omega_1^S} = \frac{3(1-\xi)^{2/3}}{2+(1-\xi)^2}; \quad \bar{\Omega}_2 \equiv \frac{\Omega_2}{\Omega_2^S} = \frac{3(1-\xi)^{4/3}}{1+2(1-\xi)^2}; \quad \bar{\Omega}_3 \equiv \frac{\Omega_3}{\Omega_3^S} = 1. \quad (15)$$

Соответствующие аналитические зависимости также показаны на рис. 5.

Как видно из рисунка, существует хорошее согласие между аналитическими и измеренными в компьютерном эксперименте зависимостями  $\bar{\Omega}_i(\xi)$ ,  $i = 1, 2, 3$ . Наблюдаемые же расхождения, по-видимому, связаны с кристаллографической *огранкой* поверхностей вакансионных пор. Выше это явление обсуждалось для  $\xi = 0$ . Из рис. 4, б видно, что значение подобной огранки будет возрастать по мере увеличения коэффициента сжатия поры. Ясно, что в пределе схлопнутой поры (при  $\xi \rightarrow 1$ ) ее поверхность будет состоять в основном из двух фрагментов кристаллографических плоскостей, нормальных к оси сжатия поры.

Отметим, что для эллипсоида инвариант  $\Omega_3$  имеет то же значение, что и для сферы. Действительно, можно показать, что  $\Omega_1$  и  $\Omega_2$  инвариантны относительно преобразований подобия, а  $\Omega_3$  — относительно аффинных преобразований. Все эллипсоиды можно рассматривать как результат аффинных преобразований сферы (в общем случае — анизотропного растяжения относительно главных осей). Поэтому эллипсоиды имеют одно и то же значение  $\Omega_3$ .

## Заключение

В основе многоуровневого компьютерного моделирования лежат несколько хорошо разработанных численных методов, описывающих физические процессы на отдельных уровнях, и основная задача состоит в интегрировании их в единое целое. В статье предложен метод, обеспечивающий часть решения подобной задачи интеграции атомного и мезоскопического уровней при последовательном моделировании. А именно разработан алгоритм, который позволяет на атомном уровне детектировать появление компактного подмножества с дефектной кристаллическостью, определять его внешнюю границу и измерять интегральные характеристики: объем, площадь поверхности, коэффициент компактности и характеристический вектор формы. Этот алгоритм не предполагает участия человека. Он может быть встроен в последовательные многоуровневые схемы и представляет собой шаг на пути их интеграции, которая необходима для проведения реальных массовых вычислений эволюции реакторных материалов.

Автор считает своим приятным долгом поблагодарить доцента О. П. Кульментьеву за большую помощь при обсуждении полученных результатов и подготовке рукописи.

### Список литературы

1. Ghoniem N. M., Busso E. P., Kioussis N., Huang H. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview // *Philosoph. Magazine*. 2003. Vol. 83, No 31–34. P. 3475–3528.
2. Makov G., Gattinoni C., De Vita A. *Ab initio* based multiscale modelling for materials science // *Model. and Simulat. in Mat. Sci. and Eng.* 2009. Vol. 17, No 8. P. 084008.
3. Коршунов С. Н., Мартыненко Ю. В., Скорлупкин И. Д., Столярова В. Г. Влияние механической деформации на развитие гелиевой пористости // *Журнал тех. физ.* 2009. Т. 79. Вып. 4. С. 82–89.
4. Кульментьев А. И., Кульментьева О. П. Описание свойств поверхности нанокластеров при атомистическом компьютерном моделировании // *Вісник СумДУ. Серія: Фізика, математика, механіка*. 2008. № 2. С. 107–116.
5. Кульментьев А. И., Кульментьева О. П. Метод измерения формы нанокластера при атомистическом компьютерном моделировании // *Нано- і електронна фізика*. 2009. Т. 1, № 3. С. 60–73.
6. Cleveland C. L., Luedtke W. D., Landman Uzi. Melting of gold clusters // *Phys. Rev.* 1999. В 60, No 7. P. 5065–5077.
7. Кульментьев А. И., Кульментьева О. П. ЭВМ-эксперименты с одноатомными газами. I. Компьютерная модель идеального газа // *Вісник СумДУ. Серія: Фізика, математика, механіка*. 1997. № 1(7). С. 100–104.
8. Новиков И. И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: Металлургия, 1983.
9. Черемской П. Г., Слезов В. В., Бетехтин В. И. Поры в твердом теле. М.: Энергоатомиздат, 1990.
10. Kendall D. G. The diffusion of shape // *Advances in Applied Probability*. 1977. No 9. P. 428–430.
11. Lo C. H., Don H. S. 3-d moments forms: their construction and application to object identification and positioning // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 1989. Vol. 11, No 10. P. 1053–1064.
12. MacSleyne J. P., Simmons J. P., De Graef M. On the use of moment invariants for the automated analysis of 3D particle shapes // *Model. and Simulat. in Mat. Sci. and Eng.* 2008. Vol. 16, No 4. P. 045008.
13. Eisenberg M. A., Malvern L. E. On finite element integration in natural co-ordinates // *Int. J. for Num. Methods in Eng.* 1973. Vol. 7, No 4. P. 574–575.

Статья поступила в редакцию 14.06.11.