

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

**А. И. Кульментьев**

Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская, 58, г. Сумы, 40030  
E-mail: [kulmentev@mail.ru](mailto:kulmentev@mail.ru)

Предложен метод, позволяющий при последовательном многоуровневом моделировании реакторных материалов на атомном уровне детектировать появление компактных кластеров атомов с нарушенной кристалличностью, определять внешнюю границу такого дефектного кластера и измерять его коэффициент компактности. Это дает возможность производить разделение радиационных структурных дефектов по признаку вакансионного или межузельного типа. Предложен также эффективный алгоритм для измерения формы произвольного атомного образования. Выполнен компьютерный эксперимент, в котором имитируется процесс схлопывания изначально сферической поры. Получены зависимости параметров формы поры от коэффициента сжатия и проведено их сравнение с вычисленными аналитическими выражениями. Показано, что метод позволяет определять фазу схлопывания поры и направление ее наиболее вероятной дальнейшей эволюции.

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

Создание реакторов деления следующего поколения и реакторов синтеза невозможно без проведения 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 добавок, используемых для комплексного легирования, 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.

Фундаментальные исследования проблемы радиационных повреждений твердых тел позволи-

ли сформулировать единое теоретическое описание происходящих при этом процессов. Высокоэнергетические налетающие частицы сталкиваются с атомами решетки и генерируют каскады атомных столкновений. В результате образуются неравновесные точечные дефекты и кластеры таких дефектов с высокой пространственной корреляцией. При повышенных температурах, характерных для активной зоны реактора, эти дефекты диффундируют и перегруппировываются по всему объему облучаемого материала. Вторичные дефекты формируют новые комплексные микроструктуры, изменяя микроскопические и макроскопические свойства материала. В свою очередь это может приводить к размерным нестабильностям, таким как радиационное распухание или радиационная ползучесть, что очень негативно влияет на надежность и эксплуатационные характеристики изделия, изготовленного из соответствующего материала.

Таким образом, эволюция материала под облучением представляет многоуровневое явление,

охватывающее широкий интервал пространственно-временных масштабов. Изучение его экспериментальными методами представляет собой трудную задачу, требующую длительных испытаний и значительных инвестиций. Кроме того, если для реакторов деления четвертого поколения предполагаемые условия облучения можно реализовать с помощью существующего оборудования, то для реакторов синтеза в настоящее время не существует источников нейтронов с узким энергетическим распределением вблизи 14,1 МэВ, которые могли бы смоделировать необходимую дозу облучения (~ 200 сна) в достаточно большом объеме материала (сна – смещение на атом).

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 модели-

рования 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 (рис. 1).

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 модели более низкого уровня. Поэтому переход к следующему уровню приводит к уменьшению числа степеней свободы и, как следствие, описание поведения системы фиксированного размера в течение заданного промежутка времени требует меньших вычислительных затрат. Это обстоятельство позволяет при переходе на более высокие уровни рассматривать систему большего размера в течение большего времени.

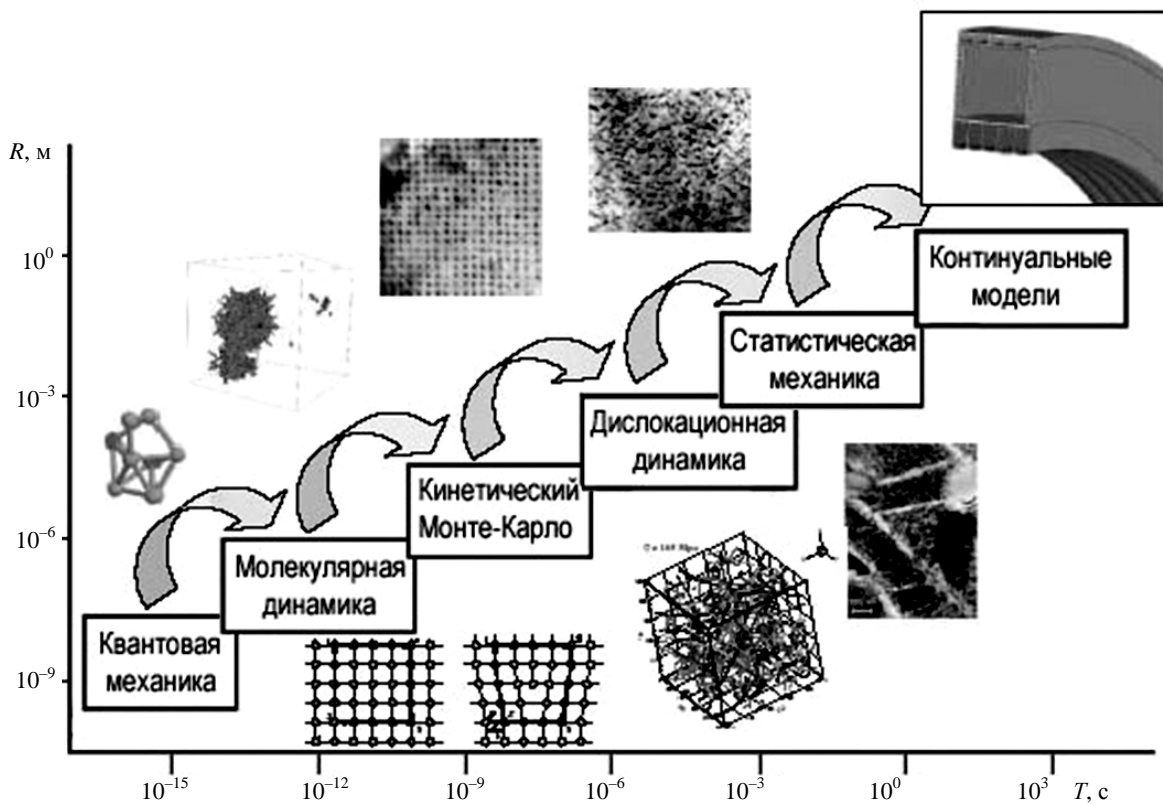


Рис. 1. Иерархическое упорядочение в плоскости время – пространство моделей, используемых при разработке радиационно-стойких материалов, из которых предполагается изготовление структур (фрагмент в верхнем правом углу), окружающих ядро плазмы в реакторе синтеза [1]

Формальное обоснование многоуровневого 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 соответствующем 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. Еще один шаг может состоять в усреднении по всем основным электронам и представлении их эффективным потенциалом. Аналогичная процедура применительно к валентным электронам приводит к атомистической модели, в которой электронные степени свободы описываются с помощью межатомного потенциала.

Следующий шаг состоит в выделении компактных атомных образований и описании их как единых 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. Кроме того, облучение может приводить к существенному ускорению диффузии, что, в свою очередь, вызывает пространственное разделение компонентов в сплавах (сегрегацию) и формирование атомных кластеров.

Таким образом, в последовательных многоуровневых схемах актуальной является задача разработки методов и алгоритмов, позволяющих выделять подмножество структурных элементов данного уровня, которые образуют единый элемент следующего уровня, а также 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.

### 1. Эволюция вакансионной поры

В результате облучения конструкционных материалов в активной зоне реактора в них образуются разнообразные первичные радиационные

дефекты: вакансии, межузельные атомы, а также примеси, которые могут объединяться в различные комплексы – вакансионные поры, дислокационные петли и примесные выделения. Предельными случаями являются сферические и плоские комплексы. В первом случае вначале в ядре простого каскада столкновений образуется маленькая группа вакансий, которая затем начинает расти за счет избыточного (по сравнению с межузельными атомами) потока вакансий на пору. Энергия такого сферического комплекса связана с образованием дополнительной поверхности

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

где  $\gamma$  – коэффициент поверхностного натяжения, а  $R$  – эффективный радиус поры, который определяется из условия равенства объема сферы радиуса  $R$  суммарному объему  $n_v$  объединившихся вакансий, каждая из которых имеет объем  $\Omega_v$ :

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

В процессе эволюции сферические поры могут деформироваться и захлопываться в наиболее плотноупакованной плоскости кристалла. При этом сначала формируется диск, а затем плоские стороны 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]

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

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

$$R_l = \Omega_v^{1/3} \left( \frac{n_v}{\pi} \right)^{1/2}.$$

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  $n_v > n_{cr}$  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. Например, сферическая полость стабилизируется локальным растягивающим напряжением или в результате заполнения ее атомами гелия, которые являются продуктом ядерных реакций типа  $(n, \alpha)$ . Напротив, сжимающее напряжение уменьшает значение  $n_{cr}$ . Поэтому при многоуровневом моделировании материала под облучением необходимо на атомном уровне иметь алгоритм, который позволял бы:

1) детектировать формирование комплекса первичных радиационных дефектов в виде вакансионной поры;

2) предсказывать направление ее наиболее вероятной дальнейшей эволюции.

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

Рассмотрим вначале 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 как положение 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.

## 2. Анализ общих ближайших соседей

Традиционно анализ структуры конфигураций, формирующихся при моделировании динамической эволюции атомных систем, основывался на исследовании радиальной парной корреляции

онной функции  $g(r)$ . По определению, она описывает вероятность обнаружить произвольный атом на расстоянии  $r$  от выбранного атома. Для твердых структур функция  $g(r)$  обладает ярко выраженными максимумами и минимумами. При этом первый пик парной корреляционной функции соответствует первой координационной сфере, а первый минимум разделяет первую и вторую сферы.

В расчетах функция  $g(r)$  получается в результате усреднения по всем атомам системы, и поэтому рассматриваемый метод наиболее подходит для анализа пространственно однородных систем. Так, путем сравнения измеренной в компьютерном эксперименте функции  $g(r)$  с парными корреляционными функциями идеальных кристаллов в некоторых случаях удается идентифицировать тип кристаллической решетки рассматриваемой системы. 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. По определению, произвольная пара атомов  $a - b$  считается связанной, если атомы достаточно близки друг к другу, т. е. если 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 данного атома  $a$  совокупность всех связанных с ним атомов определяет множество  $N_a$  его ближайших соседей. Анализ показывает, что даже в совершенном кристалле не все связи  $a - b$  атома  $a$  с его ближайшими соседями геометрически эквивалентны. Поэтому множество  $N_a$  можно разде

лить на совокупность непересекающихся подмножеств:

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

таких, что связи  $a - b$  в пределах отдельного подмножества  $\alpha$  под действием операций точечной группы симметрии переходят друг в друга. Характеристика локальной кристалличности рассматриваемого атома может состоять в указании мощности множества  $N_a$  (числа всех ближайших 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, 7] было показано, что вполне работоспособную 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  $ijk$ :  $i$  – мощность множества  $N_{ab}$  (число общих ближайших соседей);  $j$  – число связей между атомами множества  $N_{ab}$  и  $k$  – длина наибольшей непрерывной цепочки, которую можно составить из этих  $j$  связей. При этом третий параметр вводится для дифференцирования связей, которые геометрически различны, но характеризуются одинаковыми значениями параметров  $i$  и  $j$ . (Примером может служить пара ГЦК- и ГПУ-решеток.) Существует обобщение CNA-метода, в котором с этой же целью вводится четвертый параметр  $h$ , который принимает значение 1, если рассматривается связанная пара атомов  $a$  и  $b$ , и значение 2, если пара атомов не связана, но имеет общих ближайших соседей. При этом пара атомов  $a$  и  $b$  характеризуется уже четырьмя параметрами  $hijk$ . Ниже мы будем использовать стандартный вариант CNA-метода.

На рис. 2 показан пример применения CNA-метода для описания локальной кристалличности атома в ГЦК-решетке. Произвольный атом в этой решетке имеет 12 ближайших соседей (рис. 2,а) и с каждым из них он делит четырех общих ближайших соседей ( $i = 4$ ), из которых можно сформировать две связи ( $j = 2$ ) (рис. 2,б). Поскольку

длина самой длинной непрерывной 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  $12 \times 421$ .

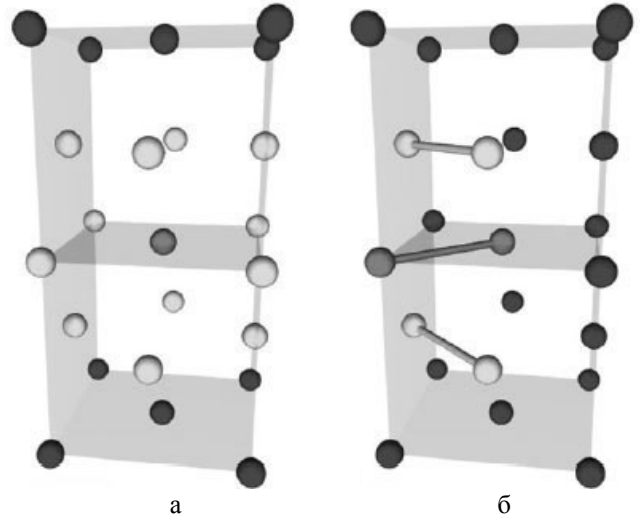


Рис. 2. Иллюстрация CNA-метода на примере ГЦК-решетки: а – две элементарные ячейки. Серым цветом выделен атом, для которого определяется тип его локальной кристалличности. 12 светлых атомов формируют множество его ближайших соседей; остальные (темные) атомы расположены на расстоянии  $r > r_{\text{cut}}$ ; б – серым цветом выделена связь рассматриваемого атома с одним из его ближайших соседей; светлыми показаны четыре атома, формирующие множество общих ближайших соседей этой связи, и две связи между этими четырьмя атомами

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 их структурных дефектов приведена в [7]. Достоинством CNA-метода является его сравнительная простота. Использование лишь целочисленных параметров делает его устойчивым относительно небольших случайных смещений атомов, что выгодно отличает CNA-метод, например, от анализа многогранников Вороного.

Применение СНА-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 кластера. С этой целью рассмотрим вначале метод идентификации атомов, лежащих на поверхности атомного кластера.

### 3. Метод идентификации атомов поверхности компактного кластера

Широкий спектр методов для анализа атомной структуры поверхностей разработан в молекулярной биологии для изучения строения и функций молекул. Среди них выделяется группа методов, основанных на представлении о качестве по поверхности пробной сферы. В данной работе предлагается метод, основанный на этой же общей идее.

Рассмотрим гладкую поверхность, ограничивающую некоторую замкнутую область  $\Omega$  и пробную сферу радиуса  $R_s$ . Для произвольного положения центра пробной сферы пересечение поверхности 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, и 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 все

гда 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 радиуса  $R_a$ , то весь континуум  $\mathbf{S}$  положений центра пробной сферы можно представить в виде  $\mathbf{S} = \mathbf{S}_1 \supset \mathbf{S}_2 \supset \mathbf{S}_3 \supset \dots$ , где  $\mathbf{S}_i$  – множество положений пробной сферы, в которых она касается одновременно  $i$  атомов поверхности (при этом  $\mathbf{S}_1 \equiv \mathbf{S}$ ). Легко видеть, что множества  $\mathbf{S}_1$  и  $\mathbf{S}_2$  имеют мощность континуума, а множество  $\mathbf{S}_3$  – конечно, и это обстоятельство может быть использовано для дискретизации рассматриваемой поверхности.

В соответствии с этим определим фиксированное положение пробной сферы как такое, 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. 3,а). 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, перекатывая пробную сферу через любое из его ребер (сторон треугольника) так, чтобы она сохраняла контакт с двумя из атомов (на рис. 3,б – с атомами  $A$  и  $B$ ), пока сфера не коснется третьего атома следующего элемента поверхности (на рис. 3,б – атома  $D$ ). При этом важно, что любое из ребер  $r$ -редуцированной поверхности является общим ребром двух смежных треугольных элементов.

Таким образом, частичный характер рассматриваемой системы приводит к естественной дискретизации  $r$ -редуцированной поверхности, а последовательное перекатывание пробной сферы через неисследованные ребра обеспечивает связывание всех треугольных элементов поверхности в единое целое. При этом необходимо отслеживать, чтобы не учитывать дважды один и тот же элемент. Этого можно достичь за счет использования соответствующих структур данных для представления и хранения элементов и выполнения необходимых проверок перед включением вновь определенного элемента в список.

Для кластера первый шаг состоит в расчете положения  $\mathbf{R}_C$  его центра масс и минимального расстояния  $r_{\min}$  между частицами кластера. В расчетах мы определяли радиус атома  $R_a$  в виде  $r_{\min}/2$ ,

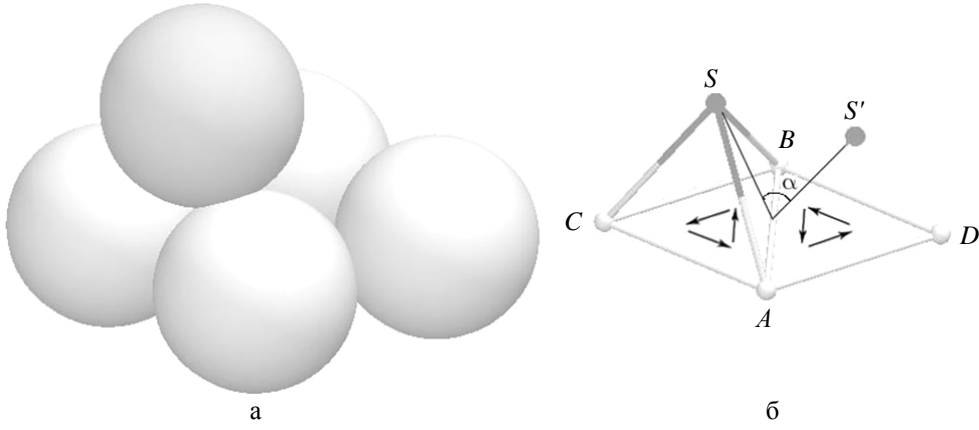


Рис. 3. Фиксированное положение пробной сферы (затемнена) с центром в точке  $S$ , при котором она одновременно касается трех атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$  поверхности (а); иллюстрация перехода от данного к следующему фиксированному положению пробной сферы (б)

а радиус пробной сферы  $R_s = \alpha R_a$ , где для представленных ниже результатов использовалось значение  $\alpha = 1$ . Как видно из рис. 3, для фиксированного положения пробной сферы расстояние между ее центром и центром любого из атомов равно  $R_{tot} = R_a + R_s$ . Затем находилось максимальное значение одной из координат частиц кластера, и пробная сфера размещалась вне кластера в начальной точке  $S_0$  с радиус-вектором  $\mathbf{r}_0$ . Вектор  $\mathbf{d} = \mathbf{R}_C - \mathbf{r}_0$  задавал 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, например, единичной скоростью  $\mathbf{v}_0$  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 и 2) оценка времени до столкновения. Используемые при этом алгоритмы характерны для модели твердых сфер и подробно описаны в [8]. 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 этого списка и проверяем, входит ли он в первый полигон, т. е. можем ли мы определить

первое фиксированное положение пробной сферы. Из рис. 3 видно, что для того, чтобы атом  $A$  входил в первый полигон, он должен иметь, по меньшей мере, двух ближайших соседей, расположенных на расстоянии, меньшем, чем  $2R_{tot}$ . Это следует из неравенства треугольника, так как все атомы, находящиеся в контакте с пробной сферой, располагаются от ее центра на расстоянии  $R_{tot}$ . Очевидно, что такое же неравенство должно выполняться и для расстояния между атомами  $B$  и  $C$ . В соответствии с этим отыскивалась первая тройка атомов кластера  $\{A, B, C\}$ , для которых эти ограничения выполняются, и рассчитывалось определяемое ими фиксированное положение пробной сферы (рис. 4).

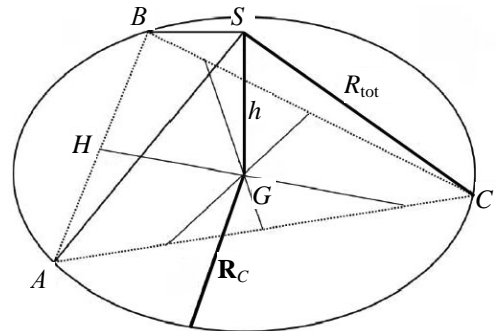


Рис. 4. Иллюстрация процедуры определения фиксированного положения  $S$  пробной сферы, при котором она одновременно касается трех атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$

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 принять ориентацию полигона. Это можно сделать, если задать последовательность обхода вершин. В этом случае внешние ребра полигона определяются однозначно. Для определенности в расчетах принималось, 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  $C$  менялись местами.

Затем для выбранной тройки атомов  $\{A, B, C\}$  рассчитывались координаты фиксированного положения центра пробной сферы  $\mathbf{r}_S$ . Если  $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$  и  $\mathbf{r}_C$  – радиус-векторы атомов  $A, B$  и  $C$  соответственно, то координаты  $\mathbf{r}_S$  представляют собой решение системы из трех нелинейных уравнений, вытекающих из условия равноудаленности на расстоянии  $R_{tot}$  точки  $\mathbf{r}_S$  от точек  $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B$  и  $\mathbf{r}_C$ . Заметим, что эта система имеет два решения, соответствующие расположению пробной сферы «над» и «под» плоскостью на рис. 4.

В настоящей работе использовался другой, более эффективный в вычислительном отношении способ решения этой задачи, основанный на геометрических построениях и операциях линейной алгебры. Три не лежащие на одной прямой точки  $\mathbf{r}_A, \mathbf{r}_B, \mathbf{r}_C$  однозначно определяют плоскость и лежащую в этой плоскости окружность, описанную вокруг треугольника  $ABC$ . Из геометрических соображений ясно, что центр пробной сферы в фиксированном положении расположен на прямой, перпендикулярной этой плоскости и проходящей через центр окружности. В соответствии с этим вначале определялись координаты  $\mathbf{r}_G$  центра описанной окружности. Инструментальный метод построения этого центра 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: радиус-вектора, определяющего середину (например) 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 на основе теоремы синусов. В расчетах использовалось следующее, вытекающее из этой теоремы выражение:

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

Затем определялись 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  $\mathbf{r}_G = \mathbf{r}_H + \text{coeff} \times HG \mathbf{n}$ , где  $\text{coeff}$  – коэффициент, который в зависимости от угла при вершине  $C$  может принимать одно из трех значений:  $-1$  (угол тупой),  $0$  (угол прямой) или  $+1$  (угол острый).

После нахождения  $\mathbf{r}_G$  рассчитывался радиус-вектор фиксированного положения центра пробной сферы. Из рис. 4 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, происходило 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 в списке задавался в виде объекта данных производного типа, который включал 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 ли уже перекачивание пробной сферы через данную сторону или нет.

Поэтому вначале среди всех уже найденных полигонов поверхности отыскивался первый, в котором хотя бы одна из сторон не обработана, и определялся соседний полигон, отвечающий пробной сфере, перекатившейся через данную сторону (сторона  $AB$  на рис. 3,б). Для этого в кластере выделялись все атомы, с которыми может



прийти в контакт пробная сфера, т. е. атомы, удаленные на расстояние, меньшее  $2R_{\text{tot}}$ , как от атома  $A$ , так и от атома  $B$ . Для каждого из таких атомов  $D$  рассчитывались координаты фиксированного положения пробной сферы. При этом использовались те же алгоритмы, которые применялись при определении первого элемента поверхности.

Затем из всех рассматриваемых атомов выбрался первый, с которым придет в контакт пробная сфера, перекатывающаяся через сторону  $AB$ . Из рис. 3,б видно, что каждый из таких атомов можно характеризовать углом поворота  $\alpha$ , таким, что  $\alpha \in [0, 2\pi)$ , 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

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

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

Определенный полигон поверхности заносился в общий список лишь после проверки, что он не совпадает ни с одним из ранее найденных полигонов. При этом для уменьшения влияния ошибок округления сравнивались не координаты фиксированных положений пробной сферы, а упорядоченные списки целочисленных номеров атомов – вершин полигонов. Процесс определения поверхности завершался тогда, когда в списке больше не было 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

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

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

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

Будем в дальнейшем моделировать дефектный кластер полиэдром с внешней границей  $\Gamma$ . Сле-

дующий шаг состоит в разделении структурных дефектов по признаку вакансионного или межузельного типа. Такое разделение можно производить на основе измерения коэффициента компактности [9].

#### 4. Процедура измерения коэффициента компактности атомного кластера

Если, как и выше, моделировать атомы твердыми сферами радиуса  $R_a$ , 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 основанием в виде рассматриваемого полигона и вершиной, расположенной в произвольной фиксированной точке  $P$ . Очевидно, что объем соответствующей пирамиды для  $i$ -го полигона можно представить в виде

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

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

Затем перебирались атомы поверхности дефектного кластера, и для каждого из этих атомов измерялась доля его объема, которая попадает внутрь полиэдра. Центр атома поверхности совпадает с вершиной некоторого числа полигонов, сходящихся в данном атоме. Каждый из этих полигонов определяет плоскость, которая делит рассматриваемый атом на две эквивалентные полусферы. Если  $\mathbf{n}$  – нормированный вектор внешней нормали полигона, а вектор  $\mathbf{r}$  – радиус-вектор точки на поверхности сферы относительно ее центра, то при выполнении условия  $\mathbf{n}\mathbf{r} > 0$  эта точка заведомо будет лежать вне полиэдра. Поэтому внутри полиэдра окажутся лишь те точки поверхности сферы, для которых противоположное условие  $\mathbf{n}\mathbf{r} < 0$  выполняется одновременно для всех полигонов, сходящихся в данном атоме.

В соответствии с этим рассмотрим некоторую сетку на поверхности сферы (границе атома). Для простоты можно выбрать равномерную прямоугольную сетку в сферических координатах  $(\theta, \varphi)$  с шагом по широте –  $\Delta\theta$  и по долготе –  $\Delta\varphi$ . Последовательно перебираем все ячейки этой сетки и для каждой ячейки определяем сферические ко-

ординаты, а затем и радиус-вектор  $\mathbf{r}$  ее центра. Если условие  $\mathbf{nr} < 0$  выполняется для всех полигонов, то площадь этой ячейки  $R_a^2 \sin \theta \Delta \theta \Delta \varphi$  добавляем к площади  $S_{in}$  той части поверхности сферы, которая лежит внутри полиэдра.

После перебора всех ячеек сетки можно оценить и долю объема рассматриваемого атома, которая попадает внутрь полиэдра:

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

В общем случае кроме атомов поверхности дефектный кластер может включать и атомы, которые будут целиком лежать внутри полиэдра. Для определения таких атомов перебираем все атомы системы (кроме атомов поверхности) и для каждого из них измеряем значение следующей 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 будут обнаружены атомы, которые целиком лежат внутри полиэдра, то прибавляем их объем к сумме по всем атомам поверхности той доли объема каждого атома, которая лежит внутри полиэдра. Искомый коэффициент компактности представляет собой отношение определенного суммарного объема к объему полиэдра.

## 5. Измерение 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 % [10]. Кроме того, на форму поры влияет также кинетика ее роста и кристаллографическая анизотропия взаимодействия вакансий с порами.

Поэтому после того как на атомном уровне детектировано образование структурного дефекта, определена атомная «поверхность» этого дефекта и выяснено, что этот дефект – пора, естественно в качестве следующего шага измерить форму поры.

Согласно широко используемому определению [11] «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 или языка для характеристики некоторого подмножества форм. Описание является следующим шагом и подразумевает задание численного дескриптора формы конкретного объекта. Дескрипторы часто выбираются в виде характеристического вектора.

Широкое распространение получили методы, в которых для представления формы используют глобальные признаки объекта, например 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), интегрирование проводится по всему пространству;  $(p_1, p_2, p_3)$  – тройка неотрицательных целых чисел, а  $p_1 + p_2 + p_3$  – порядок момента. К моментам самых низких порядков относятся объем объекта

$$V = m_{000},$$

и три момента первого порядка  $m_{100}, m_{010}, m_{001}$ , 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 целое в пространстве.

Для того чтобы удовлетворить 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 добиться инвариантности компонент характеристического вектора относительно вращений. Первый систематический подход к достижению подобной инвариантности, предложенный в 1989 г. [12], основывался на теории групп и тензорном исчислении. В [13] был использован метод описания формы, в котором используются лишь моменты второго порядка и их инварианты:

$$\begin{aligned} O_1 &= M_{200} + M_{020} + M_{002}, \\ O_2 &= M_{200}M_{020} + M_{200}M_{002} + M_{020}M_{002} - \\ &- M_{110}^2 - M_{101}^2 - M_{011}^2, \\ O_3 &= M_{200}M_{020}M_{002} + 2M_{110}M_{101}M_{011} - \\ &- M_{200}M_{011}^2 - M_{020}M_{101}^2 - M_{002}M_{110}^2. \end{aligned}$$

В соответствии с (8) для достижений масштабной инвариантности инвариант  $O_1$  нужно поделить на  $V^{5/3}$ ,  $O_2$  – на  $V^{10/3}$  и  $O_3$  – на  $V^{15/3} = V^5$ . Поэтому в [13] 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 важных трехмерных объектов (таких как тетраэдр, куб, октаэдр, эллипсоид, сфера и т. п.) можно получить аналитические выражения для компонент (9) и показать, что они имеют максимальное значение для сферы ( $\Omega_1^S$ ,  $\Omega_2^S$ ,  $\Omega_3^S$ ). Поэтому 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  $(\bar{\Omega}_1, \bar{\Omega}_2, \bar{\Omega}_3)$ , 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 векторное поле  $\mathbf{F}(\mathbf{r})$  определяется сравнительно просто:

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

Действительно, легко проверить, что

$$\text{div } \mathbf{F}(\mathbf{r}) = \frac{\partial F_x}{\partial x} + \frac{\partial F_y}{\partial y} + \frac{\partial F_z}{\partial z} = x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}.$$

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

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

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

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

Вычисление интегралов, входящих в последнее соотношение, подробно изучено в методе конечных элементов. В частности, показано, что существенного упрощения можно достичь в результате перехода к естественным координатам ( $L_1$ ,  $L_2$ ,  $L_3$ ). В основе этого упрощения лежит следующее интегральное соотношение [14]:

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

где  $S$  – площадь полигона и для удобства обозначений индекс полигона в этом и последующих выражениях опущен. Использование этого соотношения и формулы бинорма 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  $(x_3, y_3, z_3)$ :

$$\begin{aligned} m_{p_1 p_2 p_3} &= \int_{\Gamma} \frac{x^{p_1} y^{p_2} z^{p_3}}{3} \left( \frac{x n_x}{p_1 + 1} + \frac{y n_y}{p_2 + 1} + \frac{z n_z}{p_3 + 1} \right) d\sigma = \\ &= \frac{2S}{3(P+3)!} \sum_{k_1=0}^{p_1} \sum_{k_2=0}^{p_2} \sum_{k_3=0}^{p_3} \binom{p_1}{k_1} \binom{p_2}{k_2} \binom{p_3}{k_3} \times \\ &\quad \times x_3^{p_1-k_1} y_3^{p_2-k_2} z_3^{p_3-k_3} (P-K)! \times \\ &\quad \times \sum_{j_1=0}^{k_1} \sum_{j_2=0}^{k_2} \sum_{j_3=0}^{k_3} \binom{k_1}{j_1} \binom{k_2}{j_2} \binom{k_3}{j_3} \times \\ &\quad \times x_1^{j_1} y_1^{j_2} z_1^{j_3} x_2^{k_1-j_1} y_2^{k_2-j_2} z_2^{k_3-j_3} J!(K-J)! \times \\ &\quad \times [\Phi_1 + \Phi_2 + \Phi_3 + (\Phi_1 - \Phi_2)J + (\Phi_2 - \Phi_3)K + \Phi_3 P], \end{aligned}$$

где

$$\begin{aligned} \Phi_i &= \frac{n_x x_i}{p_1 + 1} + \frac{n_y y_i}{p_2 + 1} + \frac{n_z z_i}{p_3 + 1}, \\ P &= \sum_{i=1}^3 p_i, \quad J = \sum_{i=1}^3 j_i, \quad K = \sum_{i=1}^3 k_i. \end{aligned}$$

## 6. Компьютерный эксперимент и детали алгоритмов

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

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

Совместим центр сферы радиуса  $R$  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 – те, 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 его форму.

Для моделирования процесса схлопывания поры многократно повторим описанный выше эксперимент, но теперь в исходном состоянии будем удалять из расчетной ячейки атомы, лежащие внутри не сферы, а эквиобъемного ей эллипсоида вращения. Такой эллипсоид можно рассматривать как результат «сжатия» сферической поры.

Пусть центр эллипсоида совмещен с тем же узлом решетки, что и центр сферической поры, а главные оси совпадают с кристаллографическими осями. В этом случае каноническое уравнение эллипсоида 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 (выбранной совпадающей с осью  $z$  – осью сжатия поры) получается эллипсоид вращения. Определим коэффициент сжатия  $\xi$  следующим образом:

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

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

Обозначим через  $V_0 = n_v \Omega_v$  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  $V_0$ , получим для заданного значения коэффициента сжатия следующие выражения для полуосей  $a$  и  $b$ :

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

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 системой (14). Очевидно, что для точек  $\mathbf{r}(x, y, z)$  внутри эллипсоида вращения  $f(\mathbf{r}) < 0$ , на его поверхности  $f(\mathbf{r}) = 0$  и вне  $-f(\mathbf{r}) > 0$ . 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 исходная атомная конфигурация, соответствующая сжатой поре.

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

### 7. 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  $a_{\text{lat}}$ ). Для моделирования тепловых колебаний каждый атом затем 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  $0,05a_{\text{lat}}$ .

В эксперименте рассматривалась пора, образовавшаяся в результате слияния  $n_v = 400$  вакансий. Рассчитанный по формуле (11) эффективный радиус сферической поры (коэффициент сжатия  $\xi = 0$ ) был равен  $2,88a_{\text{lat}}$ , а число атомов, для которых  $f(\mathbf{r}) < 0$ , – 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. атомов, для каждого из которых число его ближайших отличалось от 12. Конкретно, 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 его внешняя граница.

На рис. 5 показаны поперечные сечения расчетных ячеек, соответствующих двум значениям коэффициента сжатия (12), плоскостью, проходящей через центр поры и совпадающей с одной из координатных плоскостей (в данном случае – с плоскостью  $xz$ ). Более темным цветом на рисунке выделены дефектные атомы. Видно, что для

обоих коэффициентов сжатия пору ограничивает один слой дефектных атомов. На первый взгляд для  $\xi = 0$  форма поры близка к сферической, однако более внимательный анализ показывает, что ее поверхность образуют шесть достаточно больших фрагментов кристаллографических плоскостей типа (100), восемь – плоскостей типа (111) и атомы, лежащие на общих границах этих восьми фрагментов. Это утверждение проиллюстрировано на рис. 6,а, а на рис. 6,б показан полиэдр, которым моделируется внешняя граница кластера дефектных атомов. Этот полиэдр в рассматриваемом случае состоит из 606 треугольных полигонов и имеет объем, равный  $519,3\Omega_{\text{ат}}$ . Измеренный описанным выше способом коэффициент компактности кластера дефектных атомов оказался равным 0,1207. Сравнение его с соответствующим коэффициентом в исходном бездефектном кристалле – ГЦК-решетке (который равен 0,7405 [9]), позволяет однозначно классифицировать рассматриваемое дефектное образование как вакансионную пору.

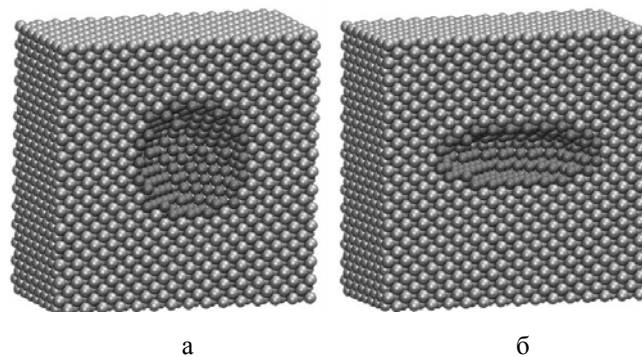


Рис. 5. Вид в разрезе расчетной ячейки для двух значений коэффициента сжатия:  $\xi = 0$  (а) и  $\xi = 0,7$  (б). Более темным цветом выделены атомы с дефектной локальной кристалличностью

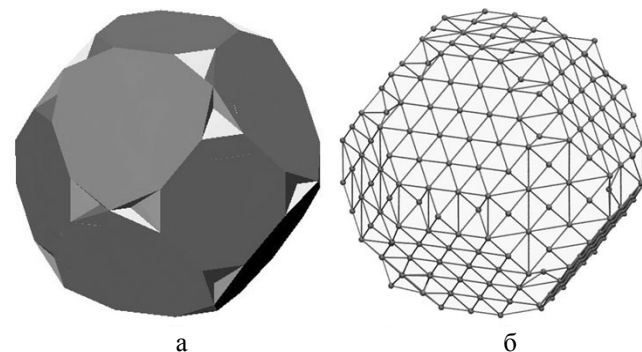


Рис. 6: а – аппроксимация границы поры фрагментами кристаллографических плоскостей типа (100) и (111); б – полиэдр, моделирующий внешнюю границу кластера дефектных атомов в виде объединения треугольных полигонов

На рис. 7 показано, как при сжатии поры меняются параметры, характеризующие ее форму. Для эллипсоида, главные оси которого совпадают с кристаллографическими осями, а полуоси равны  $(a, a, a(1 - \xi))$ , можно получить аналитическое выражение для моментов второго порядка:

$$\begin{aligned} \mu_{200} &= a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi), & \mu_{020} &= a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi), \\ \mu_{002} &= a^5 \frac{4\pi}{15} (1 - \xi)^2, \end{aligned}$$

а объем определяется формулой (13). В результате приходим к следующим выражениям для инвариантов моментов:

$$\begin{aligned} \Omega_1 &= \left( \frac{2000\pi^2}{9} \right)^{1/3} \frac{3(1 - \xi)^{2/3}}{2 + (1 - \xi)^2} = \Omega_1^S \frac{3(1 - \xi)^{2/3}}{2 + (1 - \xi)^2}, \\ \Omega_2 &= \left( \frac{2000\pi^2}{9} \right)^{2/3} \frac{3(1 - \xi)^{4/3}}{1 + 2(1 - \xi)^2} = \Omega_2^S \frac{3(1 - \xi)^{4/3}}{1 + 2(1 - \xi)^2}, \\ \Omega_3 &= \frac{2000\pi^2}{9} = \Omega_3^S. \end{aligned}$$

И, следовательно,

$$\bar{\Omega}_1 \equiv \frac{\Omega_1}{\Omega_1^S} = \frac{3(1 - \xi)^{2/3}}{2 + (1 - \xi)^2}, \quad (15)$$

$$\bar{\Omega}_2 \equiv \frac{\Omega_2}{\Omega_2^S} = \frac{3(1 - \xi)^{4/3}}{1 + 2(1 - \xi)^2}, \quad (16)$$

$$\bar{\Omega}_3 \equiv \frac{\Omega_3}{\Omega_3^S} = 1. \quad (17)$$

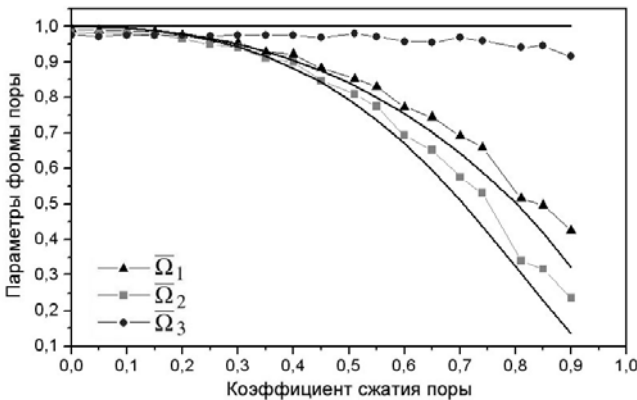


Рис. 7. Зависимость параметров формы поры от коэффициента сжатия  $\xi$ . Сплошные линии – аналитические выражения (15)–(17)

Соответствующие аналитические зависимости также показаны на рис. 7. 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 мы обсуждали это явление для  $\xi = 0$ . Из рис 5,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 оси сжатия поры.

Отметим, что для эллипсоида инвариант  $\Omega_3$  имеет то же значение, что и для сферы. Причиной этого является то, что, как было показано в [15],  $\Omega_1$  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 последовательных и гибридных многоуровневых схемах эта задача решается по-разному. В статье предложен метод, являющийся частью решения подобной задачи интеграции атомного и мезоскопического уровней при последовательном моделировании. Конкретно разработан алгоритм, который позволяет на атомном уровне детектировать появление компактного подмножества с дефектной кристалличностью, 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 при подготовке рукописи.

### Список литературы

1. Ghoniem N. M., Busso E. P., Kiousis N., Huang H. Multiscale modelling of nanomechanics and micromechanics: an overview // *Philosophical Magazine*. 2003. Vol. 83, N 31–34. P. 3475–3528.
2. Makov G., Gattinoni C., A De Vita. *Ab initio* based multiscale modelling for materials science // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2009. Vol. 17, N 8. P. 084008.
3. Коршунов С. Н., Мартыненко Ю. В., Скорлупкин И. Д., Столярова В. Г. Влияние механической деформации на развитие гелиевой пористости // *Журнал технической физики*. 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 // *Журнал нано- і електронна фізика*. 2009. Т. 1, № 3. С. 60–73.
6. Honeycutt J. D., Andersen H. C. Molecular dynamics study of melting and freezing of small Lennard-Jones clusters // *The Journal of Physical Chemistry*. 1987. Vol. 91, N 19. P. 4950–4963.
7. Cleveland C. L., Luedtke W. D., Landman Uzi. Melting of gold clusters // *Physical Review*. 1999. Vol. B 60, N 7. P. 5065–5077.
8. 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.
9. Новиков И. И. Дефекты кристаллического строения металлов. М.: *Металлургия*, 1983.
10. Черемской П. Г., Слезов В. В., Бетехтин В. И. Поры в твердом теле. М.: *Энергоатомиздат*, 1990.
11. Kendall D. G. The diffusion of shape // *Advances in Applied Probability*. 1977, N 9. P. 428–430.
12. 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, N 10. P. 1053–1064.
13. MacSleyne J. P., Simmons J. P., DeGraef M. On the use of moment invariants for the automated analysis of 3D particle shapes // *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*. 2008. Vol. 16, N 4. P. 045008.
14. Eisenberg M. A., Malvern L. E. On finite element integration in natural co-ordinates // *International Journal for Numerical Methods in Engineering*. 1973. Vol. 7, N 4. P. 574–575.
15. Mamistvalov A. G. N-dimensional moment invariants and conceptual mathematical theory of recognizing n-dimensional solids // *IEEE Transactions on Pattern Analysis and Machine Intelligence*. 1998. Vol. 20, N 8. P. 819–831.

Статья поступила в редакцию 17.11.2011.