

**ОПИСАНИЕ СВОЙСТВ ПОВЕРХНОСТИ НАНОКЛАСТЕРОВ  
ПРИ АТОМИСТИЧЕСКОМ КОМПЬЮТЕРНОМ МОДЕЛИРОВАНИИ****А.И. Кульментьев, О.П. Кульментьева\****Институт прикладной физики НАН Украины, ул. Петропавловская, 58,  
г. Сумы, 40030;**\*Сумский государственный университет, ул. Римского-Корсакова, 2,  
г. Сумы, 40007*

*Предложен численный метод идентификации и анализа поверхности атомного кластера. Дан обзор существующих в литературе подходов к решению этой задачи. Проведен анализ алгоритмов, разработано необходимое программное обеспечение и на примере модельных кластеров проведено его тестирование. Предлагаемый метод обеспечивает одновременное однозначное определение атомов поверхности и ее мозаичное представление, которое затем может быть использовано для вычисления различных интегральных характеристик кластера. Установлены некоторые общие качественные особенности оценок площади поверхности и объема малых атомных систем.*

**ВВЕДЕНИЕ**

В настоящее время твердо установлено, что переход от макрообъектов к нанообъектам с линейными размерами 1 – 100 нм приводит к качественным изменениям их физико-химических свойств. Наиболее ярко это проявляется в существовании у наночастиц осциллирующих размерных эффектов. Последние могут быть, в частности, обусловлены тем, что малые атомные системы часто обладают выраженной оболочечной структурой и локальный экстремум свойств соответствует заполнению очередной оболочки.

Наночастицы являются предметом исследования новой междисциплинарной области знаний – нанонауки, а нанотехнология занимается реализацией на практике их необычных свойств. Одним из существенных отличий нанотехнологии от классической технологии является требование предварительного конструирования, моделирования и расчета разрабатываемых систем. Поэтому компьютерное моделирование становится технологическим средством производства [1]. При этом поскольку наночастицы занимают промежуточное положение между отдельными молекулами и малыми макроскопическими частицами, то их согласованное теоретическое описание и последующее моделирование предполагает совместное использование формального аппарата как микро- так и макрофизики.

Принято различать два типа размерных эффектов [2]: собственный, или внутренний, связанный со специфическими изменениями в поверхностных, объемных и химических свойствах частицы, и так называемый внешний, который является размернозависимым ответом на внешнее действие сил, независимых от внутреннего эффекта. Областью, в которой необходимо учитывать оба этих эффекта, является радиационное материаловедение. Для него характерно объединение первичных радиационных дефектов в разнообразные нанокластеры, которые эволюционируют в условиях сложных внешних температурных и силовых полей.

Современные ЭВМ позволяют проводить детальное атомистическое моделирование кластеров, например, в рамках метода молекулярной динамики, и часто представляет информацию, критичную для понимания их поведения. Однако атомистическое моделирование по своей сути дискретно, т.е. включает только позиции атомов, но не обладает собственным представлением о коллективных модах системы, которые

могли бы служить основой для определения макроскопических характеристик кластеров. Важнейшей подобной характеристикой является внешняя поверхность кластера. Для описания поверхности при атомистическом моделировании необходимо обеспечить микроскопическое определение этой макроскопической концепции, которое должно быть робастным и эффективным в вычислительном отношении.

Целью настоящей работы является разработка способа описания свойств и эволюции поверхности кластеров при атомистическом компьютерном моделировании и тестирование метода на примере кластеров с хорошо определенной поверхностью.

## МЕТОД ОПИСАНИЯ ПОВЕРХНОСТИ КОМПАКТНОГО АТОМНОГО КЛАСТЕРА

В задаче макроскопического описания внешней поверхности компактного атомного кластера можно выделить две составляющие. Во-первых, необходим алгоритм, который мог бы определить, является ли данный атом частью поверхности или нет. И, во-вторых, необходимо обеспечить идентификацию поверхности в целом как единой связной сущности в терминах размера, положения и формы.

Задача выделения атомов поверхности является проблемой классификации, которая в соответствии с принятым классификационным признаком позволяет разделить все атомы системы на два непересекающихся подмножества: лежащие и не лежащие на поверхности. Существует множество подобных признаков физической или геометрической природы. В качестве основы можно взять, например, потенциальную энергию каждого атома. В этом случае относительно высокие энергии ассоциируются с дефектами, которые включают в себя и поверхности [3]. Фильтрация потенциальной энергии является не слишком затратной в вычислительном отношении, поскольку классические МД коды уже обычно конструируются так, что в них рассчитывается энергия каждого атома на каждом временном шаге.

Атомы поверхности лежат на границе областей с высокой и низкой локальной атомной плотностью и их можно выделить, если разделить систему на ячейки и найти те атомы, которые попадают в ячейки с полной атомной плотностью, соседствующие с пустыми ячейками [4]. Другие геометрические признаки основаны на измерениях локальной конфигурации. К ним относятся анализ отклонения от centrosимметричности [5], в котором используется тот факт, что во многих распространенных кристаллографических структурах каждый атом является центром инверсии для соседей. Дефекты разрушают эту симметрию и это отклонение легко измерить. Другие методы включают измерение порядка ориентационной связи или анализ общих соседей [6]. Используя эти признаки, были разработаны методы выделения атомов поверхности. Однако эти методы не идентифицируют поверхность как целое.

Широкий спектр методов для анализа поверхностей разработан в молекулярной биологии для изучения структуры и функций молекул. Среди них выделяется группа методов, основанных на представлении о качении по поверхности пробной сферы. Выбирая радиус этой сферы равный радиусу молекулы растворителя, можно определить, например, поверхность, доступную для растворителя. В данной работе предложен 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 численного 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 поверхности, и каждый атом представляет сферу радиуса  $R_a$ , 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  $S_1 = S$ ). 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 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.1 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, – и в рассматриваемом методе поверхность кластера определяется в виде  $r$ -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 (на рис.1б – с атомами  $A$  и  $B$ ), пока сфера не коснется третьего атома следующего элемента поверхности (на рис.1б – атома  $D$ ). При этом важно, что любое из ребер  $r$ -редуцированной поверхности является общим ребром двух смежных треугольных элементов.

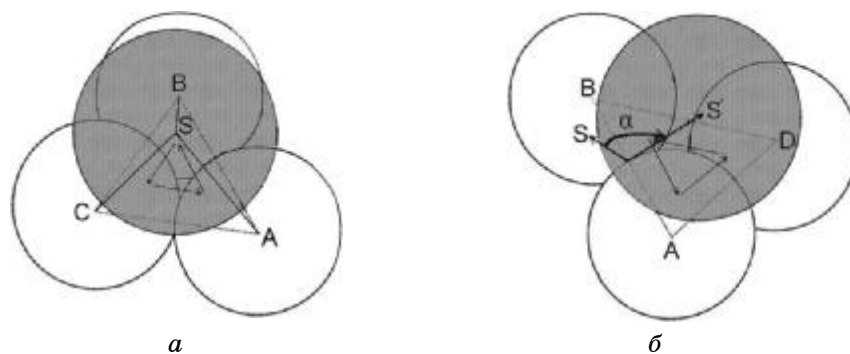


Рисунок 1 – Фиксированное положение пробной сферы (затемнена) с центром в точке  $S$ , при котором она одновременно касается трех атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$  поверхности (а); иллюстрация перехода от данного к следующему фиксированному положению пробной сферы (б)

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. 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  $R_C$  его центра масс и минимального расстояния  $r_{min}$  между частицами кластера. В расчетах мы определяли радиус атома  $R_a$  в виде  $r_{min}/2$ , а радиус пробной сферы  $R_S = \alpha R_a$ , где для представленных ниже результатов использовалось значение  $\alpha = 1,1$ . Как видно из рис.1, 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  $r_0$ . Вектор  $d = R_C - r_0$  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  $r_0$  начинает движение с некоторой, например, единичной скоростью  $v_0$  в направлении  $d$ . 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 работе авторов [7]. Атомы кластера, успешно прошедшие проверку 1), образуют подмножество, в котором каждому атому соответствует конечное значение  $t_i$ .

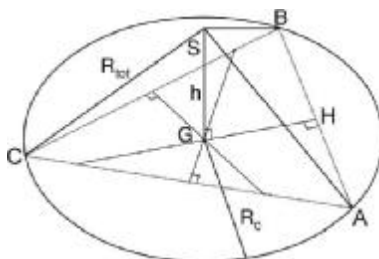


Рисунок 2 – Иллюстрация процедуры определения фиксированного положения  $S$  пробной сферы, при котором она одновременно касается трех атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$

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.1 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.2).

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. Заметим, что при этом два треугольных полигона, составленные из одних и тех же узлов, но отличающиеся ориентацией, являются двумя разными полигонами, и это обстоятельство позволяет описывать поверхности систем, включающих атомные монослои. Для определенности в расчетах принималось, что возможный кандидат в элементы поверхности ориентирован по направлению к  $S_0$ , т.е.  $\overline{AS_0} \cdot (\overline{AB} \times \overline{AC}) > 0$ . 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  $r_S$ . Если  $r_A$ ,  $r_B$  и  $r_C$  – радиус-векторы атомов  $A$ ,  $B$  и  $C$  соответственно, то координаты  $r_S$  представляют собой решение системы из трех нелинейных уравнений, вытекающих из условия равноудаленности на расстояние  $R_{tot}$  точки  $r_S$  от точек  $r_A$ ,  $r_B$  и  $r_C$ . Заметим, что эта система имеет два решения, соответствующие расположению пробной сферы "над" и "под" плоскостью на рис.2.

Мы использовали 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  $r_A$ ,  $r_B$ ,  $r_C$  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  $r_G$  центра описанной окружности. Инструментальный метод построения этого центра состоит в том, что он совпадает с точкой пересечения перпендикуляров, восстановленных к серединам сторон  $\triangle ABC$ .

Поэтому радиус-вектор центра описанной окружности равен сумме двух векторов: радиус-вектора, определяющего середину (например) стороны  $AB$  (точка  $H$ )  $r_H = (r_A + r_B)/2$  и вектора  $\overline{HG}$ . Очевидно,

$$HG = \sqrt{R_c^2 - \frac{1}{4}|r_B - r_A|^2},$$

где  $R_c$  – радиус описанной окружности, который можно рассчитать на основе теоремы синусов. В расчетах мы использовали следующее, вытекающее из этой теоремы выражение

$$R_c = \frac{|r_B - r_C| \cdot |r_C - r_A| \cdot |r_A - r_B|}{2 \cdot |(r_B - r_A) \times (r_C - r_A)|} = \frac{r_{BC} r_{CA} r_{AB}}{2 \cdot |r_{BA} \times r_{CA}|}.$$

Затем определялись орты  $r_{AB}$  и  $r_{AC}$  двух непараллельных векторов  $r_{AB}$  и  $r_{AC}$  и единичный вектор  $n$  нормальный к стороне  $AB$

$$n = \frac{r_{AC} - r_{AB}(r_{AC} \cdot r_{AB})}{|r_{AC} - r_{AB}(r_{AC} \cdot r_{AB})|}.$$

Тогда  $r_G = r_H + \text{coeff} \times HG n$ , где  $\text{coeff}$  – коэффициент, который может

принимать одно из трех значений:  $-1$ ,  $0$  или  $+1$ .

После нахождения  $\mathbf{r}_G$  рассчитывался радиус-вектор фиксированного положения центра пробной сферы. Из рис.2 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 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 необходим для указания того, происходило ли уже перекатывание 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.16). Для этого в кластере выделялись все атомы, с которыми может прийти в контакт пробная сфера, т.е. атомы, удаленные на расстояние меньше  $2R_{tot}$  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 выбирался первый, с которым придет в контакт пробная сфера, перекатывающаяся через сторону  $AB$ . Из рис.16 видно, что каждый из рассматриваемых 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

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

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

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.

После определения поверхности кластера рассчитывались его интегральные характеристики – площадь и объем. Площадь всей поверхности представлялась в виде суммы площадей отдельных

$$S_i = \frac{1}{2} |\overline{AB} \times \overline{BC}|.$$

Объем кластера определялся в виде суммы по всем элементам объемов пирамид с основанием в виде рассматриваемого элемента и вершиной, расположенной в произвольной фиксированной точке  $P$ . Для отдельного элемента

$$V_i = \frac{1}{6} \overline{AP} \cdot (\overline{AB} \times \overline{BC}).$$

Для кластера в качестве точки  $P$  мы выбрали центр масс кластера.

### РЕЗУЛЬТАТЫ РАСЧЕТОВ И ОБСУЖДЕНИЕ

Для реализации предлагаемого метода на языке Фортран 90 было разработано необходимое программное обеспечение и на примере модельного кластера (рис. 3) выполнено его тестирование. Кластер представлял фрагмент ГЦК-структуры с параметром решетки  $a$ , в котором атомы могли быть случайным образом смещены из узлов решетки. В расчетах варьировалась амплитуда смещения  $\Delta$ , которая задавалась в долях  $a$ .



Рисунок 3 – Модельный кластер, содержащий 63 атома

Для каждого значения  $\Delta$  по выборке из 10 кластеров рассчитывались среднее значение и стандартное отклонение для площади поверхности кластера и его объема. Результаты компьютерных экспериментов приведены на рис.4. Обе величины измерялись в долях от соответствующих значений  $S_0$  и  $V_0$  для упорядоченного кластера с  $\Delta = 0$ . Заметим, что эти величины для кластера, изображенного на рис.3, легко рассчитать аналитически. Из рис.4 видно, что при

$\Delta \rightarrow 0$  как площадь поверхности кластера, так и его объем стремятся соответственно к  $S_0$  и  $V_0$ , что является одним из критериев корректности программного обеспечения.

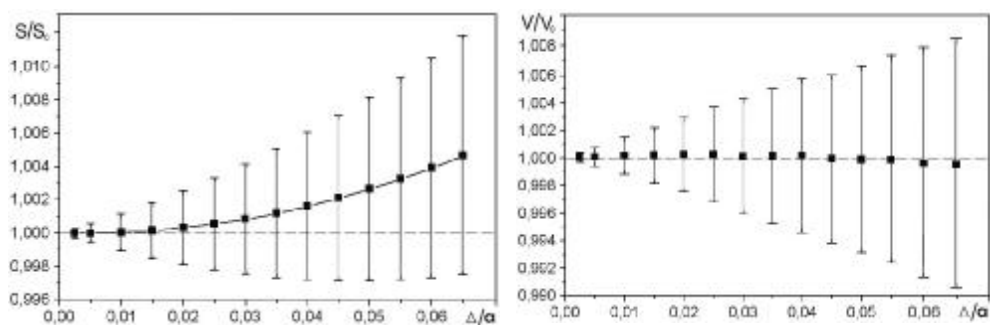


Рисунок 4 – Среднее значение (квадраты) и стандартное отклонение  $\pm \sigma$  ("усы") площади поверхности (а) и объема (б) кластера, изображенного на рис.3

При увеличении  $\Delta$  возрастает разброс измеренных значений как  $S$ , так и  $V$ , однако средние значения этих величин по-разному зависят от амплитуда смещения  $\Delta$ . Из рис.4 *a* видно, что среднее значение площади кластера монотонно возрастает при увеличении амплитуды случайных смещений атомов кластера, однако среднее значение объема остается практически неизменным. Столь разное поведение этих величин связано с тем, что случайное смещение атома поверхности как внутрь, так и наружу кластера в любом случае приводит к образованию "гофрированной" поверхности и к увеличению ее площади. Объем же кластера увеличивается только при смещении атома поверхности наружу, в противном случае объем кластера уменьшается. Таким образом, случайные смещения отдельных атомов поверхности сопровождаются противоположными отклонениями от значения  $V_0$ , которые в среднем компенсируют друг друга.

Такие качественные различия в поведении измеренных значений площади и объема можно исследовать аналитически на примере измерения этих величин для кругового цилиндра в случае показанной на рис.5 процедуры триангуляции его боковой поверхности. В этой процедуре поверхность разделена на  $m$  полос и  $n$  секторов и, например, площадь боковой поверхности  $S$  оценивается в виде суммы  $S_{\Delta}$  площадей всех малых треугольников.

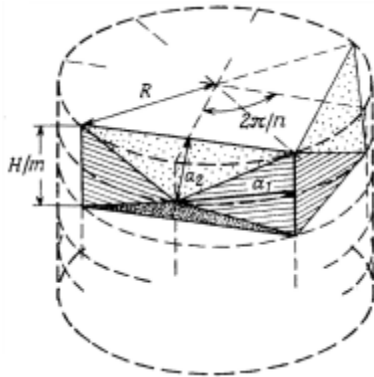


Рисунок 5 – Процедура триангуляции боковой поверхности цилиндра радиусом  $R$  и высотой  $H$ , используемая при оценке его объема и площади боковой поверхности

Из рис. 5 видно, что есть два типа треугольников –  $a_1$  и  $a_2$ , число которых для заданных  $m$  и  $n$  одинаково и равно  $N_{a_2} = N_{a_1} = 2mn$ . Можно показать, что площади отдельных треугольников

$$a_1 = \frac{1}{2} \frac{H}{m} \cdot 2R \sin \frac{1}{2} \frac{\pi}{n} = \frac{HR}{m} \sin \frac{\pi}{2n},$$

$$a_2 = \frac{RH}{m} \sin \frac{\pi}{2n} \cdot \cos \frac{\pi}{2n} \sqrt{1 + \left(\frac{R}{H}\right)^2 \frac{\pi^4 m^2}{n^4} \left(\frac{2n}{\pi} \sin \frac{\pi}{2n}\right)^4},$$

и, следовательно,

$$S_{\Delta n, m} = \pi RH \frac{2n}{\pi} \sin \frac{\pi}{2n} \left\{ 1 + \cos \frac{\pi}{2n} \sqrt{1 + \left(\frac{R}{H}\right)^2 \frac{\pi^4 m^2}{n^4} \left(\frac{2n}{\pi} \sin \frac{\pi}{2n}\right)^4} \right\}.$$

Можно ожидать, что при разбиении поверхности на все более мелкие треугольники, т.е. в пределе  $n \rightarrow \infty$  и  $m \rightarrow \infty$ , и  $S_{\Delta} \rightarrow S$ . Однако такой вывод справедлив не всегда. Используя первый замечательный предел,



получим из последнего выражения

$$S_{\Delta} = \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ m \rightarrow \infty}} S_{\Delta n, m} = \pi R H \left\{ 1 + \lim_{\substack{n \rightarrow \infty \\ m \rightarrow \infty}} \cos \frac{\pi}{2n} \sqrt{1 + \left( \frac{R}{H} \right)^2 \frac{\pi^4 m^2}{n^4}} \right\}.$$

Отсюда, во-первых, вытекает, что при любом способе разбиения  $S_{\Delta} > S = \pi R H$ , и, во-вторых, предельное значение площади зависит от способа перехода к пределу. В частности, если  $m/n^2 \rightarrow 0$ , то суммарная площадь треугольников стремится к ожидаемому пределу  $\pi R H$ . Но если мы воспользуемся триангуляцией, для которой  $m = \lambda n^2$ , то обнаружим, что  $S_{\Delta}$  может принимать сколь угодно большие значения. Следовательно, когда отдельные треугольники становятся все меньше, суммарная площадь треугольников, тем не менее, неограниченно возрастает. К аналогичным проблемам приводят и многие другие способы триангуляции. Эта ситуация известна в математике под названием парадокса Шварца с площадью боковой поверхности цилиндра [8].

Если полученные на рис. 4а результаты рассматривать как способ измерения боковой поверхности кластера, изображенного на рис. 3, для описанной процедуры триангуляции (которая характеризуется значением параметра  $\Delta$ ), то видим, что справедливы те же самые качественные выводы. Во-первых, при любом способе триангуляции  $S_{\Delta} > S_0$ , а во-вторых, при увеличении  $\Delta$  отклонение измеренного значения площади от истинного значения возрастает.

В то же время процедура измерения объема цилиндра не приводит к каким-либо неожиданным результатам. Для показанной на рис. 6 процедуры триангуляции объем цилиндра можно представить в виде предела суммарного объема  $m$  следующих одинаковых геометрических объектов: призмы высотой  $H/m$ , в основании которой лежит правильный  $n$ -угольник и  $n$  четырехгранных пирамид. Можно показать, что

$$V_{mn} = V_{\text{призм}} + V_{\text{пирамид}} = \pi R^2 H \cdot \frac{n}{\pi} \sin \frac{\pi}{n} \cdot \cos \frac{\pi}{n} + \frac{2}{3} \pi R^2 H \frac{n}{\pi} \sin \frac{\pi}{n} \cdot \left( 1 - \cos \frac{\pi}{n} \right)$$

и что  $V_{mn} \rightarrow \pi R^2 H$ . Аналогично, как видно из рис. 4б, и для кластера процедура измерения его объема дает несмещенную оценку при любом способе триангуляции.

Подчеркнем, что такие качественные различия в поведении оценок площади и объема атомного кластера нужно обязательно учитывать при интерпретации данных компьютерного моделирования.

## ВЫВОДЫ

В статье предложен численный метод идентификации и анализа поверхности атомного кластера, который является достаточно простым, эффективным, устойчивым и допускает наглядную геометрическую интерпретацию. Обязательным этапом реализации любого численного метода является его тестирование. В статье эта процедура выполнена на примере модельных кластеров с хорошо определенной поверхностью. Результаты тестирования не только доказали корректность предлагаемого метода, но и позволили установить некоторые качественные особенности оценок площади поверхности и объема малых атомных систем.

Существует несколько областей, в которых может быть использован предлагаемый метод. Во-первых, его можно применять при исследовании атомных кластеров, которые являются одним из наиболее интересных объектов нанопизики. Кроме того, в традиционном материаловедении

многие процессы, имеющие огромное технологическое значение, часто связаны с выделением и эволюцией локальных атомных образований. Современный подход к конструированию новых материалов предполагает их многоуровневое компьютерное моделирование. Предложенный метод обеспечивает связь между атомистическим и мезоскопическим уровнями при таком моделировании.

## SUMMARY

### DESCRIPTION OF SURFACE CHARACTERISTICS OF NANOCCLASTERS AT ATOMIC COMPUTER SIMULATION

*A.I. Kulment'ev, O.P. Kulment'eva\**

*Institute of Applied Physics of National Academy of Sciences;  
Sumy State University*

*Numerical techniques are presented for identification and analysis of atom cluster surface. Existing in literature approaches for this problem are reviewed. Algorithms are analysed, necessary software is developed and tested for the model clusters. Proposed techniques provides simultaneous identification of atoms constituting the surface and tessellation (meshing) of the surface that may be later used for calculating of different integral characteristics of the cluster. Some general quantitative peculiar properties of numerical estimations for surface area and volume of small atomic systems are determined.*

## СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Шека Е.Ф. Квантовая нанотехнология и квантовая химия // Рос. хим. ж. – 2002. – Т. XLVI, №5. – С. 15–21.
2. Kreibig U., Vollmer M. Optical properties of metal clusters. – Berlin, Heidelberg: Springer Verlag, 1995. – 532 p.
3. Abraham F.F. On the transition from brittle to plastic failure in breaking a nanocrystal under tension (NUT) // Europhys. Lett. – 1997. – V.38. – P.103–106.
4. Belak J. On the nucleation and growth of voids at high strain rates // J. Comp.Aided Mater. Design. – 1998. – V.5. – P.193-196.
5. Kelchner C.L., Plimpton S.J., Hamilton J.C. Dislocation nucleation and defect structure during surface indentation // Phys Rev B. – 1998. – V.5. – P. 11085–11088.
6. Lymmen N, Kraska T. Common neighbour analysis for binary atomic systems // Modelling Simul. Mater. Sci. Eng. 2007. – V.15. – P. 319–334.
7. Кульментьев А.И., Кульментьева О.П. ЭВМ-эксперименты с одноатомными газами. I. Компьютерная модель идеального газа // Вісник СумДУ. – 1997, №1(7). – С. 100–104.
8. Федер Е. Фракталы. – М.: Мир, 1991. – 254 с.

**Кульментьев А.И.**, кандидат физ.-мат. наук;  
**Кульментьева О.П.**, кандидат физ.-мат. наук, доцент

*Поступила в редакцию 23 октября 2008 г.*