

РЕШЕНИЕ ЗАДАЧИ ПОИСКА ОБЪЕМА НАНОЧАСТИЦЫ ПО ИЗВЕСТНЫМ КООРДИНАТАМ АТОМОВ, ВХОДЯЩИХ В ЕЁ СОСТАВ

© 2016 г. М.Д. СТАРОСТЕНКОВ, О.В. ЯШИН

Алтайский государственный технический университет им. И.И. Ползунова, г. Барнаул
e-mail: rubtsovsk@inbox.ru

Введение

В процессе исследований свойств нанобъектов на атомарном уровне возникает задача выделения кластеров (скоплений) атомов, которые могут образоваться в нанобъекте в результате различных факторов, таких как: внешнее нагружение (деформация растяжения или сжатия) [1, 2], несимметричность строения [3, 4], ударные волны и радиационное облучение [5].

В представленной работе рассмотрен вопрос поиска объема наночастицы (нанокластера) по известным координатам, входящим в состав наночастицы. Также авторами предложен один из вариантов критерия, по которому возможно отнесение атомов, входящих в состав нанобъекта, к кластеру.

Критерий определения принадлежности атома кластеру

При моделировании деформации в нановолокнах образуются скопления атомов или кластеры, которые можно выделить путем анализа координат. В химии понятие кластера определяется, как сложное объединение (группа) нескольких атомов или молекул, выделяющихся из других подобных молекул и объединяющихся в устойчивое (обособленное) образование [6].

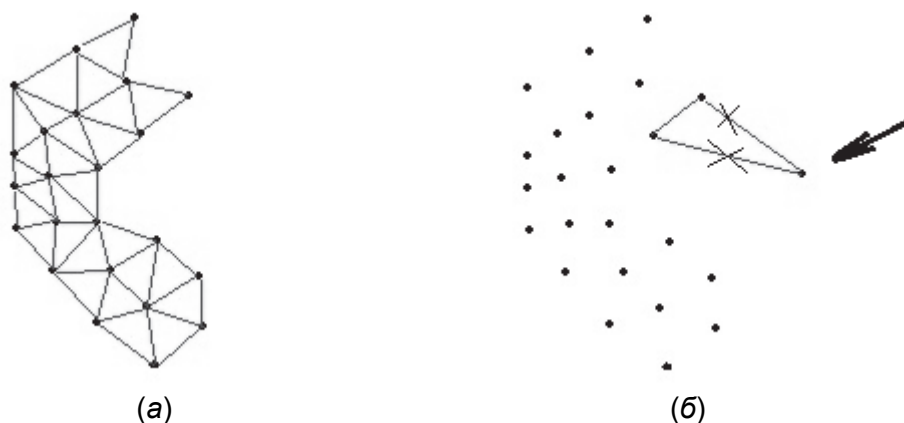


Рис. 1. Покрывание атомов кластера сетью из треугольников (а) и атом, который не может быть отнесен к кластеру из-за несоответствия выбранному критерию (б).

Любой кластер может быть представлен в виде мозаики из треугольников в двумерном случае и в виде набора тетраэдров (пирамид с треугольным основанием) в трехмерном случае. Тогда критерием отнесения атома к кластеру может быть величина максимальной длинны стороны L такого треугольника (в двумерном случае) или ребра пирамиды (в трехмерном случае).

Для каждого атома в расчетном блоке следует определить два ближайших к нему атома, таких, что в образовавшемся треугольнике не содержится никаких других

атомов из расчетного блока. В случае, когда внутри треугольника оказывается еще какой-то атом, очевидно, что его можно разбить на еще меньшие треугольники. Все атомы, которые следует отнести к кластеру, будут частью треугольников (тетраэдров) с максимальной длиной стороны меньше заданной (рис. 1, а). Покрыв наш расчетный блок сетью треугольников (либо тетраэдров) для части атомов будет отмечено отсутствие возможности построить треугольник (тетраэдр) с максимальной длиной стороны больше определенного размера (рис. 1, б – слишком большие стороны треугольника зачеркнуты крестиками). Очевидно, что атом, который отмечен стрелкой на рис. 1, б, не может быть отнесен к кластеру.

Для определения величины максимальной длины стороны L треугольника (тетраэдра), которая будет служить критерием вхождения атома в кластер, следует руководствоваться диаграммами радиального распределения атомов в нанобъекте, либо подбирать данную величину путем перебора, последовательно выстраивая сеть кластеров для различных значений указанной величины.

Методика и алгоритм решения задачи поиска площади (объема) кластера

Алгоритм расчета объема кластера, состоящего из атомов, может быть записан следующим образом:

Шаг 0. Определяем максимальную величину стороны треугольника (ребра тетраэдра) L по диаграммам радиального распределения. Данная величина необходима для проверки критерия вхождения атома в кластер, описанной в предыдущем пункте.

Шаг 1. Выбираем первый атом расчетного блока с координатами X .

Шаг 2. Производим перебор всех возможных сочетаний для атома X . Для двумерного случая в перебор будет входить три точки (точка X и еще координаты двух атомов расчетного блока X_1 и X_2), составляющие треугольник, в который не попадает не одна другая точка расчетного блока и максимальная сторона которого не превышает величины L , определенной на шаге 0. Для трехмерного случая в перебор будет входить четыре точки (точка X и еще координаты трех атомов расчетного блока X_1, X_2, X_3), составляющие тетраэдр у которого максимальная длина ребра не превышает величины L . Для всех полученных наборов проверяем чтобы не один из атомов расчетного блока, не входящих в набор, не находился внутри треугольника (тетраэдра), образованного точками набора.

Шаг 3. Берем следующую точку X , соответствующую следующему атому расчетного блока, и повторяем шаг 2 для нее. Данное действие повторяется для всех атомов расчетного блока. В результате получим множество наборов точек $\{X, X_1, X_2\}$ для двумерного случая и $\{X, X_1, X_2, X_3\}$ для трехмерного случая.

Шаг 4. Отсеиваем в полученном множестве наборов повторяющиеся сочетания. Выделяем поднаборы. Поднабор будут составлять все наборы, у которых совпадает хоть одна из точек X, X_1, X_2 или X_3 с точками уже отнесенными к данному поднабору $\{X, X_1, X_2, X_3\}$.

Шаг 5. Считаем площади всех треугольников входящих в поднабор по имеющимся координатам $\{X, X_1, X_2\}$ в двумерном случае. В трехмерном случае считаем объемы всех пирамид (тетраэдров), входящих в поднабор, как шестую часть смешанного произведения трех векторов, образующих стороны пирамиды.

В результате расчетов атомы расчетного блока будут разделены по поднаборам, то есть по кластерам, будет известна площадь (объем) каждого кластера и количество атомов, входящих в его состав. Часть атомов не будет отнесена ни к какому из поднаборов, данные атомы не относятся ни к одному кластеру (одиночные атомы или атомы, попавшие в поры [6]).

Заключение

Представленный алгоритм может быть использован для развития теории пластической деформации и при исследовании деформации нановолокон металлов и сплавов с примесями, в частности, при расчете плотности образовавшихся в ходе деформации кластеров водорода в нановолокнах металлов, предварительно подвергнутых наводороживанию.

Исследование выполнено при финансовой поддержке РФФИ в рамках научного проекта № 15-58-04033 Бел_мол_а и БРФФИ в рамках проекта № Т15РМ-09, проектов РФФИ №№: 14-08-90416 Укр_А, 15-48-04127 р_Сибирь_а.

СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. *Старостенков М.Д., Сосков А.А., Яшин А.В., Яшин О.В.* Исследование зависимости предела текучести от температуры на примере бездефектных нановолокон чистых металлов Ni и Al и интерметаллида Ni₃Al // Наноинженерия. 2015. № 1 (43). С. 30-33.
2. *Starostenkov M.D., Yashin A.V., Sinitca N.V., Dudnik E.A.* Atomic mechanisms of structural reconstruction of fcc metallic nanowires in the process of tension deformation // В сборнике: 12th International Conference on Fracture 2009, ICF-12 2009. С. 1213-1221.
3. *Яшин А.В., Старостенков М.Д., Сосков А.А., Синица Н.В.* Структурная перестройка в нановолокне CuAu I при одноосной деформации растяжения в направлении <100> // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2012. Т.9. №4-2. С. 640-645.
4. *Starostenkov M., Yashin A., Sinica N.* Structural transformation in nanowires CuAu I with superstructure of L1₀ of tetragonal symmetry at uni-axial tension deformation // Key Engineering Materials. 2014. Т. 592-593. С. 51-54.
5. *Маркидонов А.В., Старостенков М.Д., Павловская Е.П., Яшин А.В., Полетаев Г.М.* Низкотемпературное растворение поры вблизи поверхности кристалла под воздействием ударных волн // Фундаментальные проблемы современного материаловедения. 2013. Т. 10. № 2. С. 254-260.
6. *Starostenkov M.D., Yashin O.V., Yashin A.V., Romanenko V.V.* The investigation of the behavior yield strength for Ni₃Al nanowires, depending on the presence of planar defects // В сборнике: Effect of external influences on the strength and plasticity of metals and alloys Book of the International seminar articles. Edition in Chief: Professor Sc. D., Starostenkov M.D.. 2015. С. 83-85.