

УДК 544.022

**ИССЛЕДОВАНИЕ СТРУКТУРЫ УПАКОВОК ТВЕРДЫХ СФЕР ВБЛИЗИ  
БЕРНАЛОВСКОЙ ПЛОТНОСТИ**

© 2009 А.В. Аникеенко, Н.Н. Медведев\*

*Институт химической кинетики и горения СО РАН, Новосибирск**Статья поступила 21 июня 2008 г.*

Изучены структурные особенности упаковок одинаковых твердых сфер в окрестности берналовской плотности, соответствующей степени заполнения пространства  $\sim 0,64$ . Эта плотность является максимальной, до которой могут существовать неупорядоченные упаковки, а выше этой плотности обязательно возникает кристаллизация. Анализ структуры проведен с использованием симплексов Делоне. Изучены агрегаты из симплексов, близких по форме к правильному тетраэдру (политетраэдры). Они имеют высокую локальную плотность, разнообразную морфологию, но несовместимы с трансляционной симметрией. Проведен перколяционный анализ этих кластеров. Показано, что "критическая" природа структурных превращений при берналовской плотности связана с появлением перколяции по политетраэдрам. С использованием чувствительного метода выявления зародышей кристаллической структуры показано, что в плотнейших неупорядоченных упаковках, действительно, отсутствуют какие-либо значимые зародыши кристаллической структуры. Их появление и быстрый рост наблюдаются при переходе через берналовскую плотность. Суммарная доля кристаллической фазы увеличивается монотонно с ростом плотности, при этом структуры ГЦК и ГПУ возникают в упаковках в различных пропорциях.

**Ключевые слова:** упаковки твердых сфер, предельная плотность упаковки, структура жидкости, структура стекла, кристаллизация, порог перколяции.

**ВВЕДЕНИЕ**

Феномен существования предельной плотности для неупорядоченных упаковок твердых шаров, открытый Дж. Берналом полвека тому назад [1], остается до конца не понятным. Ниже этой плотности возможна некристаллическая фаза, однако более плотные упаковки обязательно содержат области кристаллической структуры. Первопричина этого явления кроется в геометрических свойствах заполнения пространства шарами. В трехмерном пространстве существует противоречие между принципами укладки шаров на локальном и глобальном уровнях. Плотнейшая локальная упаковка (тетраэдрическая конфигурация четырех шаров) имеет локальную плотность (степень заполнения пространства), равную примерно 0,77. Однако тетраэдрами невозможно заполнить пространство. Поэтому плотнейшие упаковки состоят не только из тетраэдров, но также из октаэдров и имеют плотность  $\sim 0,74$  (структуры ГЦК — гранецентрированная кубическая и ГПУ — гексагональная плотнейшая упаковки). В двумерном случае другая ситуация: там плотнейшая локальная конфигурация (тройка дисков, объединенных в правильный треугольник) покрывает всю плоскость, поэтому любой кластер из таких треугольников является одновременно фрагментом плотнейшей упаковки дисков. В трехмерном пространстве тетраэдры могут объединяться, образуя агрегаты с высокой локальной плотностью. Они имеют разные размеры и морфологию, но не являются элементами кристаллической структуры. При

---

\* E-mail: nikmed@kinetics.nsc.ru

этом они присутствуют в различных системах. Такие политетраэдрические агрегаты получают при плотной насыпке твердых шариков в сосуд [ 1, 2 ], их обнаруживают в коллоидах [ 3 ], а также они всегда присутствуют в компьютерном моделировании простых жидкостей и стекол, см. например [ 4, 5 ]. Тетраэдрические конфигурации могут естественно возникать в плотных системах сферических атомов, при этом ямка между тройкой шаров, составляющей грань тетраэдрической конфигурации, может легко быть заполнена другим шаром. В результате получается кластер из двух смежных тетраэдров. Аналогичным образом в какую-либо ямку на гранях этого кластера может встроиться еще один шар, и так далее. Понятно, что такие кластеры из смежных по граням тетраэдров возникают естественным образом при стремлении шаров упаковаться плотнее. Они являются более вероятными, чем фрагменты кристаллической структуры, для образования которых требуются дополнительные условия. Там тетраэдры связаны ребрами, причем так, чтобы между ними возникли октаэдрические полости. Как показывает опыт, при насыпке шаров в мешку никогда не возникает кристаллическая структура. Для этого требуются либо "зародыш" кристалла, например, плоская стенка, инициирующая плоские слои шаров, либо длительная "утряска" системы [ 1, 6 ]. В атомных системах "утряска" всегда имеет место за счет тепловых движений атомов, поэтому вещество, как правило, успевает перейти в кристаллическую фазу [ 7 ], однако сверхбыстрое охлаждение жидкости приводит к образованию твердой аморфной фазы.

Итак, с геометрической точки зрения, структура плотной неупорядоченной системы сферических атомов (жидкости) принципиально не совместима со структурой кристалла [ 1 ]. Этот вывод имеет важные физические следствия, в частности, изучая фазовые переходы, следует учитывать не только подвижность атомов или особенности межатомных взаимодействий, но и свойства пространства, в котором располагаются наши атомы. Традиционные исследования фазовых переходов жидкость—кристалл или аморфная фаза—кристалл посвящены, по сути, вопросам кинетики структурных превращений, т.е. изменений, происходящих за счет температурных или других воздействий на систему. Для того чтобы понять геометрический аспект перехода от неупорядоченного к упорядоченному состоянию, требуются особые подходы. Недавно эта проблема была исследована нами в работах [ 8—11 ], где была изучена структура компьютерных моделей упаковок твердых шаров в зависимости от плотности. Такой анализ помогает ответить на вопрос, какая структура является наиболее характерной для данной плотности. В частности, было показано, что для неупорядоченных упаковок характерен "политетраэдрический" принцип укладки. Поскольку политетраэдры сами по себе не дают компактного заполнения пространства, и между ними возникает неоптимальная укладка шаров, то с ними не удается достичь высокой плотности.

В данной работе мы продолжаем исследование структурных особенностей упаковок твердых сфер, обращая внимание на перколяционные характеристики политетраэдрических кластеров и поиск кристаллических ядер вблизи берналовской плотности.

#### МЕТОД

Наши модели содержат по 10 000 твердых сфер одинакового размера в кубе с периодическими граничными условиями. Детали их получения см. в работах [ 8, 11 ]. Напомним, что каждый раз мы исходим из случайного распределения шаров в пространстве. С помощью известных алгоритмов [ 12, 13 ] шаг за шагом исходная система приводится к системе неперекрывающихся шаров заданной плотности. В случае использования алгоритма Лубачевского—Стиллингера [ 12 ] исходная система изначально состоит из неперекрывающихся шаров, но имеет низкую плотность. В случае алгоритма Жодре—Тори [ 13 ], наоборот, исходная система плотная, но состоит из перекрывающихся шаров. Параметры алгоритмов подбирались таким образом, чтобы не было излишней "утряски" (релаксации), способствующей кристаллизации. Полученные таким образом упаковки являются "наиболее вероятными конфигурациям шаров при данной плотности" [ 10, 14 ]. Независимые упаковки, имеющие близкую плотность, обладают одинаковыми структурными чертами, а именно, у них совпадают функции радиального распре-

деления, статистика многогранников Вороного и симплексов Делоне. Для каждой из рассмотренных плотностей было получено до 10 независимых упаковок (всего проанализировано примерно 300 упаковок).

Анализ структуры проводится с помощью симплексов Делоне [15]. Обычно мы различаем симплексы по их форме. Однако при исследовании кристаллических ядер используется новая характеристика симплекса — структурный тип, который определяется как формой данного симплекса, так и формой соседних симплексов [5]. В данной работе мы выявляем в упаковках симплексы искомой формы или структурного типа, устанавливаем, какие кластеры они образуют, и проводим их анализ. Перколяционный анализ проводится с помощью сетки Вороного. Каждый узел сетки представляет собой центр одного из симплексов Делоне, а каждая связь сетки означает, что соседние симплексы имеют общую грань. Таким образом, проблема легко формализуется как перколяционная задача узлов на четырехкоординированной сетке [15].

### ПОЛИТЕТРАЭДРИЧЕСКИЙ ПРИНЦИП СТРУКТУРЫ

В работе [10] впервые был найден структурный параметр, который претерпевает резкое изменение при переходе через берналовскую плотность. Это отношение доли симплексов Делоне, имеющих тетраэдрическую форму,  $n_T$ , к доле симплексов, форма которых близка к квартоктаэдрической,  $n_Q$ . Кривая имеет резкий максимум, положение которого определяется с хорошей точностью ( $\sim 0,645$ ). Все другие известные в литературе структурные характеристики, как это было специально исследовано в работе [8], ведут себя невыразительно, демонстрируя, в лучшем случае, изгиб в окрестности берналовской плотности. В [10] было показано, что принципиальное изменение структуры упаковок при переходе через берналовскую плотность происходит в узкой окрестности этой точки, что позволяет говорить о "критическом" характере этого перехода.

В работах [9, 11] был предложен другой параметр, чувствительный к структурным изменениям, — доля симплексов Делоне в политетраэдрических кластерах. Учитываются симплексы, форма которых близка к форме правильного тетраэдра, при этом только те, которые входят в состав кластеров, состоящих из трех и более тетраэдрических симплексов. Особенность этих кластеров (политетраэдров) в том, что они не характерны для плотнейших кристаллических структур, в отличие от отдельных тетраэдров и пар тетраэдров (бипирамид). На рис. 1 показано, как меняется доля таких симплексов в упаковках с изменением плотности. В работе [11], откуда взят этот рисунок, были описаны разные подходы для отнесения симплексов к классу тетраэдров, а также проведено сравнение результатов для компьютерных моделей, полученных разными алгоритмами, и экспериментальных упаковок акриловых шариков [2]. Отметим здесь только то, что все данные хорошо ложатся на одну кривую, которая также имеет четко выраженный максимум при берналовской плотности. Пока упаковки остаются неупорядоченными, доля политетраэдров монотонно растет с плотностью. Затем наблюдается спад, который вызван появлением кристаллических структур, где тетраэдры объединяются ребрами, что приводит к исчезновению политетраэдров.

В работе [9] мы специально исследовали вопрос о природе критического поведения структуры упаковки. Интересно понять, какое свойство или параметр неупорядоченной структуры исчерпывает себя, в результате чего становится невозможным дальнейшее увеличение плотности упаковки при сохранении ее неупорядоченности. Было показано, что таким параметром, который достигает своего предела, является доля шаров, участвующих в формировании тетраэдрических конфигураций. К указанной плотности она достигает 100 % [9]. Еще один параметр, на который можно обратить внимание, — доля тетраэдров (или доля объема, занимаемая тетраэдрами). Оказывается, к предельной плотности они составляют примерно треть упаковки, т.е. столько же, сколько занимают тетраэдры в плотнейших кристаллах. Можно говорить, что неупорядоченная упаковка "насыщается" тетраэдрами, и дальнейшее повышение плотности на этом пути становится невозможным.

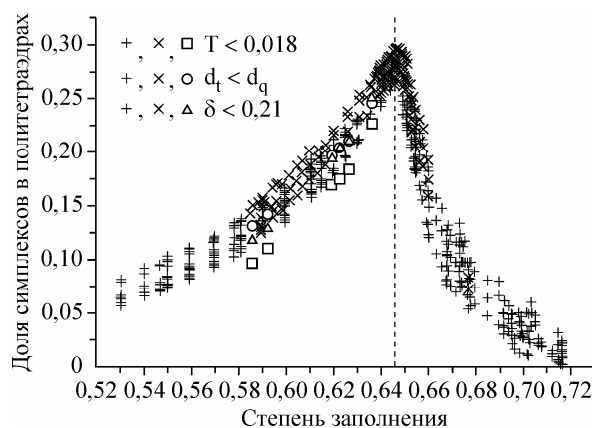


Рис. 1. Доля симплексов Делоне, принадлежащих политетраэдрическим кластерам в упаковках твердых сфер, в зависимости от плотности упаковки.

Вертикальная линия указывает значение берналовской плотности (~0,645). Крестики относятся к компьютерным моделям, сплошные символы — к экспериментальным упаковкам. Детали рисунка см. в подписи к рис. 2 и 6 работы [ 11 ]

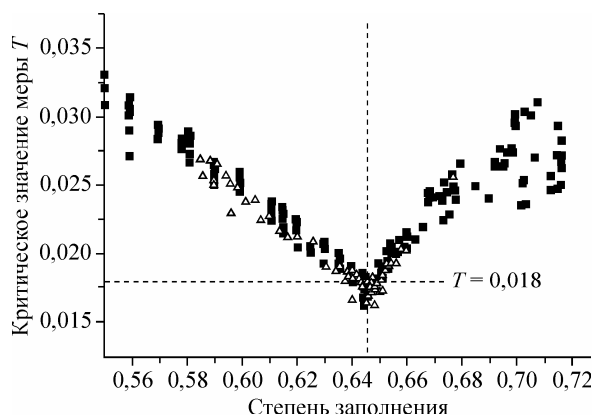


Рис. 2. Критическое значение меры  $T$  в зависимости от плотности упаковки.

Вертикальный пунктир показывает значение берналовской плотности, горизонтальный пунктир — значение  $T = 0,018$ . Каждый символ соответствует отдельной упаковке, для моделей, полученных с помощью разных алгоритмов, использованы разные символы (см. текст)

Итак, нет сомнения в критическом характере перехода между неупорядоченной и кристаллической фазами упаковки твердых сфер, однако пока предложенные объяснения являются интуитивными. Требуются количественные исследования природы этого феномена. Представленный ниже перколяционный анализ политетраэдрических кластеров является шагом в этом направлении.

### ПЕРКОЛЯЦИОННЫЙ АНАЛИЗ

В данной работе для выделения тетраэдрических симплексов Делоне мы ограничились использованием меры  $T$  (тетраэдричность) [ 11, 16 ], относя к классу тетраэдров симплексы, для которых  $T < 0,018$ . Как было показано ранее, использование других разумных способов выделения класса тетраэдров не влияет на физические выводы. Для изучения перколяционных свойств политетраэдрических кластеров мы "окрашивали" симплексы в разбиении Делоне исследуемой упаковки в порядке увеличения меры  $T$  до тех пор, пока не возникнет перколяционный кластер из окрашенных симплексов. Предельное значение меры  $T_c$ , по достижении которого произошла перколяция, мы называем *критическим значением* меры  $T$ . Оно зависит от структуры упаковки. При низкой плотности, когда хороших тетраэдров мало, перколяционный кластер получается за счет дополнительного привлечения более искаженных симплексов, т.е. значение  $T_c$  будет достаточно большим. Для упаковок, где есть области кристаллической структуры, значение  $T_c$  также будет большим. В этом случае многие тетраэдры уже не смежны по граням, поэтому для достижения перколяции придется окрашивать дополнительные симплексы. В частности, это будут искаженные квартоктаэдры, располагающиеся между тетраэдрами. Таким образом, мы строим перколяционный кластер, который включает в себя все тетраэдрические симплексы, но в него могут также входить и искаженные, не относящиеся к классу тетраэдров, симплексы. На рис. 2 показано, как меняется значение  $T_c$  в зависимости от плотности. Особой точкой на кривой является берналовская плотность. Тот факт, что для таких упаковок  $T_c$  оказывается близким к 0,018, означает, что в этих упаковках перколяционный кластер состоит только из хороших тетраэдров. Другими словами, мы видим, что при берналовской плотности возникает перколяция по политетраэдрам.

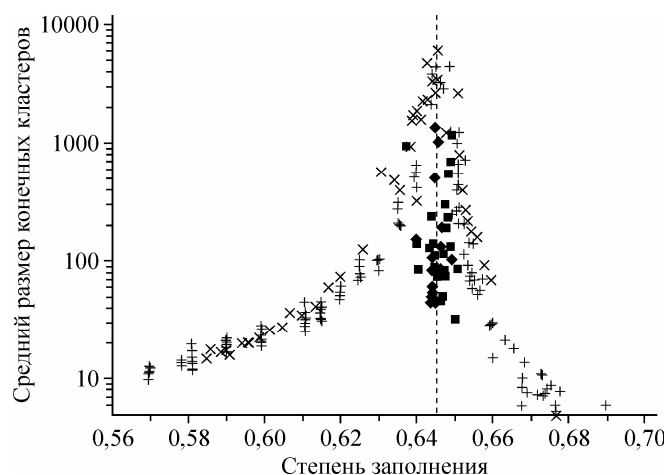


Рис. 3. Средний размер конечных политетраэдрических кластеров в зависимости от плотности упаковки.

Крестики относятся к моделям, где нет перколяционного кластера, сплошные символы — к моделям, где существует перколяционный кластер из политетраэдров (см. текст)

Физики считают, что появление перколяционного кластера означает, что система достигла некоторого предельного состояния, после которого в ее свойствах происходят радикальные изменения. В данном случае конечные политетраэдры объединились в "макроскопический" кластер, пронизывающий всю упаковку. Это может означать, что возможности роста политетраэдров исчерпаны, и дальнейшее повышение плотности упаковки за их счет становится невозможным.

Еще одна иллюстрация перколяционного характера структурных изменений в окрестности берналовской плотности приведена на рис. 3, где показано поведение среднего размера конечных кластеров — стандартной характеристики теории перколяции [17, 18]. При приближении к порогу перколяции средний размер конечных кластеров быстро растет. В упаковках с плотностью порядка 0,62 политетраэдры содержат примерно по 100 симплексов, а к плотности 0,64 они вырастают примерно в 100 раз. Напомним, что упаковка, состоящая из 10 000 шаров, имеет порядка 60 000 симплексов Делоне.

Заметим, что поведение кластеров среднего размера в нашем случае не следует сравнивать с теоретическими формулами теории перколяции количественно. Формулы описывают размер в зависимости от доли окрашенных узлов сетки, мы рассматриваем зависимость от плотности системы. Если при низких плотностях доля политетраэдров примерно пропорциональна плотности, то вблизи берналовской плотности наступает насыщение, а после нее доля политетраэдров резко уменьшается (см. рис. 1). Это приводит к дополнительному уменьшению размера кластеров (см. рис. 3) после перехода через критическую точку в отличие от традиционной теории перколяции, где средний размер конечных кластеров падает после порога исключительно за счет поглощения конечных кластеров перколяционным.

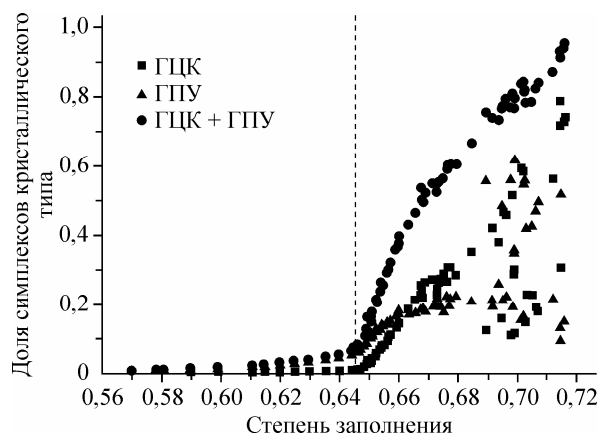
Обратим внимание, что на рис. 3 многие модели не имеют перколяционного кластера из политетраэдров. Это связано с тем, что, в отличие от рис. 2, где мы всегда рассматривали такое количество симплексов, которое необходимо для получения перколяции, на рис. 3 учтены только симплексы, относящиеся к классу тетраэдров, т.е. те, для которых  $T < 0,018$ . В упаковках, где перколяционный кластер не получился, средний размер конечных кластеров, очевидно, больше, чем там, где он возник (см. сплошные символы на рис. 3).

### ОБЛАСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ СТРУКТУРЫ

Убежденность в том, что плотная неупорядоченная упаковка не содержит кристаллических фрагментов, основывается, главным образом, на анализе функции радиального распределения, на которой отсутствуют какие-либо черты, свойственные кристаллической структуре. Однако эта функция не чувствительна к малой доле кристаллических вкраплений. Выявление внутри большого образца малых кристаллических структур является непростой задачей. Многогранники Вороного и сферические гармоники, используемые в литературе для таких целей, не способны надежно устанавливать наличие элементов кристаллической структуры, состоящих менее чем из десятков атомов [8]. Поэтому до сих пор остается открытым вопрос: при какой плотности должны появиться первые кристаллические зародыши? Быть может они в малом количестве уже присутствуют в плотных неупорядоченных упаковках?

Рис. 4. Доля объема, занимаемая симплексами Делоне данного структурного типа, в зависимости от плотности упаковки.

Показана суммарная кривая для кристаллических типов (кружки) и отдельно кривые для ГЦК (квадраты) и ГПУ (треугольники)



Недавно для поиска кристаллических зародышей было предложено использовать симплексы Делоне [5]. Однако симплекс (четверка атомов) не определяет структуру однозначно. Например, симплексы тетраэдрической формы присутствуют как в ГЦК и ГПУ, так и в плотной неупорядоченной упаковке. Было предложено рассматривать не только данный симплекс, но также учитывать его соседей. В результате каждому симплексу в упаковке можно приписать его *структурный тип*. Например, симплексы в структуре ГЦК имеют форму тетраэдра или квартоктаэдра, и при этом соседние симплексы у них четко определены структурой данной решетки. Поэтому, если в упаковке имеются тетраэдры или квартоктаэдры с соответствующими соседями, то считаем, что они обладают *типом структуры ГЦК*. Структура ГПУ также содержит симплексы тетраэдрической и квартокаэдрической формы, но им соответствуют другие наборы соседей. Если же симплекс не относится к хорошим тетраэдрам или квартоктаэдрам или имеет другой, не свойственный данным структурам, набор соседей, то он не обладает данным структурным типом и при анализе не рассматривается.

Для всех наших упаковок мы установили структурные типы симплексов Делоне. На рис. 4 показаны доли объема, занимаемые симплексами ГЦК и ГПУ типов в зависимости от плотности упаковки. Приведены кривые отдельно для каждой структуры, а также суммарная, показывающая общий объем, занимаемый кристаллическими симплексами. Этот объем начинает быстро расти при переходе через берналовскую плотность, что является прямой иллюстрацией возникновения и роста кристаллических структур.

Отметим большой разброс точек для кривых, соответствующих ГЦК и ГПУ структурам. Это означает, что упаковки, имеющие близкую плотность, могут содержать разные доли этих структур. Таким образом, известное преимущество структуры ГЦК перед ГПУ имеет место, по-видимому, только для макроскопических образцов, а для относительно малых областей, зарождающихся внутри неупорядоченной фазы, они практически равноправны. Дополнительный анализ показал, что области ГЦК и ГПУ могут присутствовать как в виде отдельных ядер, так и в виде "дефектов" в общем кристалле, вызванных нарушением чередования плотнейших кристаллических слоев. При этом обратим внимание, что общее количество кристаллической фазы в упаковке меняется с плотностью монотонно — суммарная кривая на рис. 4 изменяется плавно.

Отметим, что при плотностях ниже берналовской доля симплексов типа ГЦК ничтожна, а тип ГПУ присутствует в количестве нескольких процентов. Однако дополнительный анализ показывает, что эти симплексы "диффузно" распределены по образцу, не образуя компактных кластеров, т.е. не следует думать, что в неупорядоченной упаковке имеются ядра ГПУ. Аналогичное поведение симплексов ГПУ наблюдалось также в работе [5], где описана кристаллизация леннард-джонсовских систем. Симплексы такого типа присутствуют в плотных неупорядоченных системах благодаря наличию в них большого количества тетраэдров смежных по граням (политетраэдров). Очевидно, политетраэдры имеют повышенную вероятность быть отнесенными к типу ГПУ, так как в ГПУ имеются пары смежных тетраэдров.

На рис. 5 показана типичная картина пространственного распределения симплексов ГЦК типа внутри упаковок разной плотности. Центры симплексов представляются точками, а отрезки связывают соседние выделенные симплексы [15]. Таким образом, каждый отрезок на рисунке показывает пару смежных симплексов данного структурного типа. Заметим, что один

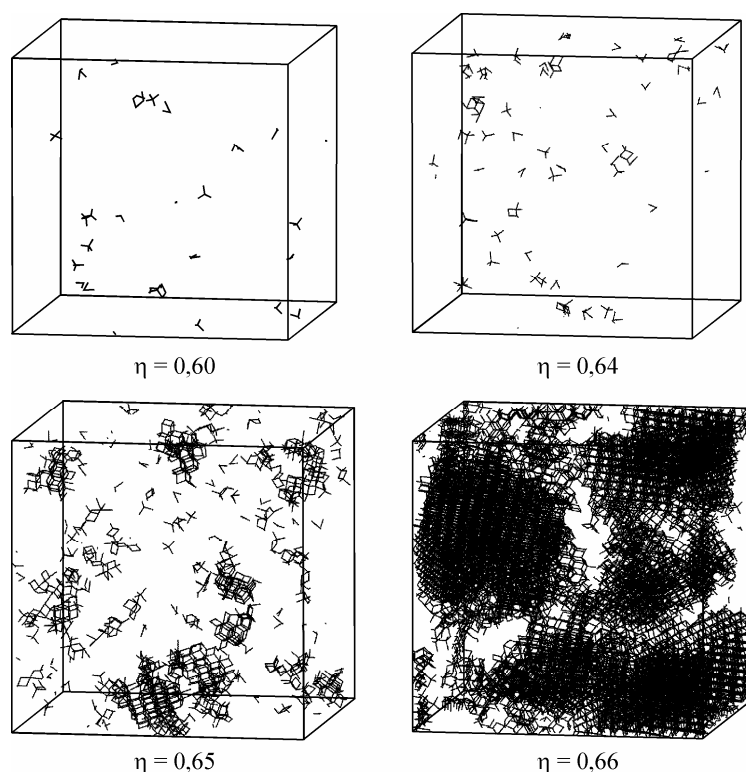


Рис. 5. Расположение симплексов Делоне, соответствующих структуре ГЦК, внутри упаковок разной плотности. Каждый отрезок соответствует паре смежных симплексов данного структурного типа

изолированный отрезок соответствует агрегату из пяти шаров, если учитывать только данную пару симплексов (вершины бипирамиды). Если дополнительно учитывать шары, образующие соседние симплексы, то такой агрегат состоит уже из 11 шаров [5, 14]. Более сложные кластеры означают более крупные агрегаты, представляющие фрагменты структуры ГЦК.

Обратим внимание, что в неупорядоченных упаковках действительно нет значимых кристаллических зародышей. Имеющиеся в них кластеры являются, скорее, случайными образованиями, и не представляют физически значимых зародышей кристаллической фазы (см. упаковки с плотностью 0,60 и 0,64).

Более плотные упаковки демонстрируют другую картину, показывая, что кристаллическая фаза в виде отдельных областей присутствует в неупорядоченной только в узком интервале плотности. Если при  $\eta = 0,64$  кристаллических зародышей нет, то при  $\eta = 0,65$  они становятся четко видимыми, а при  $\eta = 0,66$  кристаллическая фаза становится доминирующей.

### ЗАКЛЮЧЕНИЕ

Изучена структура компьютерных моделей упаковок твердых сфер одинакового радиуса при разной плотности. Для анализа использованы симплексы Делоне. С их помощью удастся выделить агрегаты, состоящие из тетраэдрических конфигураций шаров (политетраэдры), которые имеют высокую локальную плотность, но несовместимы с трансляционной симметрией. Такие элементы структуры являются основой плотных неупорядоченных упаковок. Они не могут заполнить пространство оптимально, между ними всегда возникает неплотная укладка шаров, в результате чего плотность неупорядоченных упаковок не может быть высокой, а именно, предельная степень заполнения пространства равна примерно 0,64, что было впервые установлено Дж. Берналом.

В работе представлен перколяционный анализ политетраэдрических агрегатов. При повышении плотности упаковки количество и размер политетраэдров возрастают, и к берналовско-

му значению они образуют перколяционный кластер. Появление такого кластера указывает на то, что политетраэдрический принцип упаковки, лежащий в основе неупорядоченной структуры, исчерпал себя. Дальнейшее повышение плотности возможно только за счет изменения принципа упаковки.

С помощью метода выделения симплексов Делоне, свойственных кристаллической структуре, проведен анализ кристаллических зародышей в упаковках при разной плотности. Показано, что в наших моделях полностью отсутствуют сколько-нибудь значимые кристаллические зародыши вплоть до берналовской плотности. Однако сразу после нее наблюдается появление и быстрый рост кристаллических областей. Показано, что структуры ГЦК и ГПУ могут присутствовать в разных упаковках в различных пропорциях, однако суммарная доля кристаллической фазы растет монотонно с плотностью упаковки.

Работа частично поддержана грантом Российского фонда фундаментальных исследований 08-03-00140.

#### СПИСОК ЛИТЕРАТУРЫ

1. Bernal J.D. // Proc. Royal Soc. London. Series A. – 1964. – **280**. – P. 299 – 322.
2. Aste T., Saadatfar M., Senden T.J. // Phys. Rev. E. – 2005. – **71**. – P. 061302.
3. Campbell A.I., Anderson V.J., van Duijneveldt J.S., Bartlett P. // Phys. Rev. Lett. – 2005. – **94**. – P. 208301.
4. Naberukhin Y.I., Voloshin V.P., Medvedev N.N. // Molec. Phys. – 1991. – **73**, N 4. – P. 917 – 936.
5. Аникеенко А.В., Медведев Н.Н. // Журн. структур. химии. – 2006. – **47**, № 2. – С. 273 – 282.
6. Aste T. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2005. – **17**. – P. S2361 – S2390.
7. Auer S., Frenkel D. // J. Chem. Phys. – 2004. – **120**, N 6. – P. 3015 – 3029.
8. Lochmann K., Anikeenko A.V., Elsner A. et al. // Eur. Phys. J. B. – 2006. – **53**. – P. 67 – 76.
9. Anikeenko A.V., Medvedev N.N. // Phys. Rev. Lett. – 2007. – **98**. – P. 235504.
10. Аникеенко А.В., Медведев Н.Н. // Журн. структур. химии. – 2007. – **48**, № 4. – С. 823 – 830.
11. Anikeenko A.V., Medvedev N.N., Aste T. // Phys. Rev. E. – 2008. – **77**. – P. 031101.
12. Skoge M., Donev A., Stillinger F. H., Torquato S. // Phys. Rev. E. – 2006. – **74**. – P. 041127.
13. Jodrey W.S., Tory E.M. // Phys. Rev. A. – 1985. – **32**. – P. 2347.
14. Anikeenko A.V., Gavrilova M.L., Medvedev N.N. In: Studies in Computational Intelligence / Eds. J. Каспрзык, М. Gavrilova. Berlin, Heidelberg: Springer-Verlag, 2008. – **158**. – P. 13 – 45.
15. Медведев Н.Н. Метод Вороного—Делоне в исследовании некристаллических систем. – Новосибирск: Изд-во СО РАН, 2000.
16. Medvedev N.N., Naberukhin Y.I. // J. Non-Cryst. Solids. – 1987. – **94**. – P. 402 – 406.
17. Stauffer D. Introduction to percolation theory. – L., Philadelphia: Taylor&Francis, 1985.
18. Тарасевич Ю.Ю. Перколяция: теория, приложения, алгоритмы. – М.: Изд-во Едиториал УРСС, 2002.