

РОССИЙСКАЯ АКАДЕМИЯ НАУК  
СИБИРСКОЕ ОТДЕЛЕНИЕ  
Институт химической кинетики и горения СО РАН

**Н.Н. Медведев**

**МЕТОД ВОРОНОГО –ДЕЛОНЕ  
В ИССЛЕДОВАНИИ СТРУКТУРЫ  
НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Научный редактор  
д.ф.-м.н. *В.А.Толкачев*

НОВОСИБИРСК  
ИЗДАТЕЛЬСТВО СО РАН  
НИЦ ОИГГМ  
2000

ББК В151.0 Г562 В371.2  
УДК 514.11:54-14:54-16:539.2  
М42

*Издание осуществлено при поддержке Российского фонда  
фундаментальных исследований по проекту 99-03-46007*



**Медведев Н.Н.** Метод Вороного—Делоне в исследовании структуры некристаллических систем / РАН, Сиб. отд-ние, РФФИ, Институт химической кинетики и горения СО РАН. Новосибирск: НИЦ ОИГГМ СО РАН, Издательство СО РАН, 2000, 214 с.

В монографии излагается геометрический подход к изучению структуры некристаллических систем, получаемых при компьютерном моделировании жидкостей, стекол, различных упаковок шаров. Рассматриваются математические основы метода, методические аспекты и конкретные приложения к физико-химическим задачам, для которых важно знать взаимное расположение атомов и устройство пустого межатомного пространства.

Книга предназначена для студентов, аспирантов и научных работников, использующих компьютерное моделирование в решении структурных задач физики, химии и материаловедения. Специальных геометрических знаний для чтения книги не требуется, вместе с тем уровень изложения позволяет читателю применить метод в своей работе.

ISBN 5-7692-0248-3

© Н.Н.Медведев, 2000

## ПРЕДИСЛОВИЕ

В книге излагаются основы данного геометрического подхода, рассматриваются методические моменты его реализации и применение к структурным исследованиям различных некристаллических систем. Объектами наших исследований являются компьютерные модели жидкостей, стекол, различных упаковок шаров, а также все то, что с геометрической точки зрения представляет собой ансамбль дискретных объектов, расположенных в пространстве весьма произвольным образом. Основная цель книги — показать, что данный метод является хорошим рабочим инструментом для самых разных физико-химических приложений. Автор надеется, что она будет полезной всем, кто желал бы познакомиться с методом, и тем, кто уже использует его в своих исследованиях.

Математические основы метода исходят из важных результатов, полученных в свое время Г.Ф. Вороным и Б.Н. Делоне для систем точечных центров. Ключевым пунктом всего подхода является использование фундаментального геометрического построения — области пространства, ближайшей к данному центру. С помощью таких областей, называемых многогранниками Вороного, можно естественным образом поделить пространство между объектами системы, что, в свою очередь, дает базис для количественного анализа ее структуры. Необходимым шагом для физических приложений метода является переход от системы точек к системам шаров или тел другой формы. Для одинаковых шаров такой шаг не вызывает проблем, однако уже для шаров разного размера потребовались новые математические наработки. Чтобы практически использовать метод, нужны эффективные алгоритмы для расчета наших геометрических построений. Этот этап работы оказывается непростым, так как создание соответствующих компьютерных программ — весьма кропотливая работа. В книге рассматриваются основные алгоритмы построения разбиения Вороного—Делоне и его анализа.

Возможности практического применения метода демонстрируются на решении конкретных физико-химических задач. Многогранники Вороного и симплексы Делоне используются для описания локального порядка в расположении атомов. Рассмотрение разбиения Вороного—Делоне как единой мозаики позволяет изучать пространственные структурные корреляции. В этом случае можно исследовать более тонкие особенности строения некристаллической фазы. Другим перспективным применением метода является исследование пустого межатомного пространства. Сетка Вороного представляет собой навигаци-

ционную карту системы. Она лежит “в глубине” межатомного пространства и определяет сетку “фарватеров”, проходящих через узкие горла системы. С помощью этой сетки легко находить доступный объем для зондов заданного размера, исследовать диффузионные и перколяционные свойства системы.

Рассмотрение метода в книге ограничено его применениями для случая трехмерного пространства, наиболее важного для физико-химических приложений. Для желающих работать на плоскости отметим, что все основные геометрические моменты метода остаются справедливыми, а техническая реализация, разумеется, существенно проще. Правда, здесь надо иметь в виду, что некоторые структурные проблемы трехмерного пространства не могут быть поняты на примере двумерных аналогий. Геометрические построения Вороного и Делоне успешно используются во многих других науках, как в чистой математике, так и в прикладных компьютерных областях. Однако они подробно рассматриваются в специальной математической литературе и поэтому здесь не обсуждаются.

Данная книга рассчитана на научных работников, аспирантов и студентов, использующих методы компьютерного моделирования для задач физики, химии и материаловедения. Специальных геометрических знаний для чтения книги не требуется. Автор старался избегать формального стиля в обсуждении математических вопросов. Вместе с тем изложение ведется достаточно строго и полно, чтобы читатели смогли не только понять основы метода, но и применить его в своей работе.

Автор выражает благодарность своим соавторам по научным публикациям на данную тему: Ю.И. Наберухину, В.П. Волошину, В.П. Лучникову, С.В. Анищику, С.Н. Новикову, В. Бростову, А. Гайгеру, А. Аппельхагену, Р. Бисхару, Д. Пашеку, Л. Оже, П. Ришару, Ж.-П. Труадеку, П. Маддену, коллегам за полезные и конструктивные дискуссии, способствовавшие появлению этой книги: Г.Г. Маленкову, Е.Р. Гельчинскому, В.П. Ильину, А.Д. Медных, В.А. Толкачеву, А. Жервуа, а также акад. А.Д. Александрову за деловое напутствие от геометрической школы Делоне.

Публикация книги осуществлена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований, грант № 99-03-46007.

## ОГЛАВЛЕНИЕ

ПРЕДИСЛОВИЕ .....	3
ВВЕДЕНИЕ .....	5
Часть I. ОСНОВЫ МЕТОДА .....	7
<b>1. Математические истоки метода</b> .....	7
1.1. Исторические замечания .....	7
1.2. Основные результаты Вороного и Делоне .....	9
<b>2. Система дискретных точек</b> .....	12
2.1. Разбиение Вороного .....	12
2.1.1. Плоскость, канал и узел Вороного .....	12
2.1.2. Многогранник Вороного .....	14
2.1.3. Теорема о разбиении Вороного .....	17
2.2. Разбиение Делоне .....	19
2.2.1. Метод пустого шара Делоне. Симплекс Делоне .....	19
2.2.2. Вырождение .....	21
2.2.3. Теорема о разбиении Делоне .....	23
2.2.4. Симплициальное разбиение (триангуляция) .....	24
2.2.5. Особенности взаимного расположения симплексов Делоне .....	25
2.3. Дуальность разбиений Вороного и Делоне .....	27
2.3.1. Разбиение Вороного—Делоне .....	27
2.3.2. Соответствие между элементами мозаик Вороного и Делоне .....	28
2.4. Графы и сетки .....	29
<b>3. Система одинаковых шаров</b> .....	30
3.1. $S$ -построения Вороного—Делоне .....	30
3.2. Предварительные геометрические утверждения .....	31
3.3. Геометрия межшарового пространства .....	33
3.3.1. Симплициальная полость .....	33
3.3.2. Составные поры. Представление пор на сетке Вороного .....	35
3.4. О возможных перемещениях пробной частицы .....	38
3.5. Особенности системы перекрывающихся шаров .....	40
<b>4. Система шаров разного радиуса</b> .....	43
4.1. Подходы к анализу систем разных шаров .....	43
4.2. Основные понятия и определения .....	46
4.2.1. $S$ -поверхность (гиперboloид) Вороного .....	46
4.2.2. $S$ -канал Вороного. Конфигурации троек шаров .....	47
4.2.3. Свойства $S$ -каналов Вороного .....	50
4.2.4. Интерстициальная сфера. Конфигурации четверок шаров .....	52
4.3. $S$ -область Вороного .....	53

4.3.1. Типы $S$ -областей Вороного .....	54
4.3.2. Свойства $S$ -областей Вороного .....	56
4.4. $S$ -разбиение Вороного .....	57
4.5. $S$ -симплекс Делоне .....	58
4.6. $S$ -сетка Вороного .....	60
4.7. Навигационная карта межшарового пространства .....	61
<b>5. Система выпуклых тел несферической формы .....</b>	<b>63</b>
5.1. Обобщения разбиения Вороного .....	64
5.1.1. Математический взгляд на обобщения .....	64
5.1.2. Медиальные оси .....	65
5.1.3. Модель Джонсона—Мэла .....	66
5.2. Разбиение Вороного системы выпуклых тел .....	68
5.2.1. Предварительные геометрические замечания .....	68
5.2.2. О разбиении Вороного системы выпуклых тел .....	70
5.2.3. Сетка Вороного системы выпуклых тел .....	71
5.3. Замечания о системах невыпуклых тел .....	72
<b>6. Способы построения разбиения Вороного—Делоне .....</b>	<b>72</b>
6.1. Численное представление разбиения Вороного—Делоне .....	73
6.1.1. Сетка Вороного .....	74
6.1.2. Сетка Делоне .....	74
6.1.3. Соответствие между сетками Вороного и Делоне .....	74
6.1.4. Характерные числа .....	75
6.2. Построение индивидуальных многогранников Вороного. Метод обхода граней .....	76
6.3. Построение сетки Вороного. Метод описанной сферы .....	79
6.4. Построение $S$ -сетки Вороного для систем шаров разного радиуса .....	82
6.4.1. Общие замечания .....	82
6.5. Решение трехмерной задачи Аполлония .....	83
6.6. Построение сетки Вороного для произвольных выпуклых тел .....	86
6.6.1. Функция расстояния .....	86
6.6.2. Поиск первого узла .....	88
6.6.3. Движение вдоль связи сетки Вороного .....	88
6.6.4. Формирование сетки .....	89
Часть II. ПРИЛОЖЕНИЯ МЕТОДА	
ПРИМЕНЕНИЕ ДЛЯ АМОРФОГРАФИИ .....	91
<b>7. Структура некристаллических систем .....</b>	<b>91</b>
7.1. Развитие представлений о структуре жидкостей и стекол .....	91
7.2. Первые исследования структуры жидкости .....	94
7.3. Методы получения компьютерных моделей .....	96
<b>8. Ближний порядок .....</b>	<b>98</b>
8.1. Анализ многогранников Вороного .....	98
8.1.1. Топологические характеристики .....	99
8.1.2. Метрические характеристики .....	106

8.1.3. Упрощенные многогранники Вороного .....	109
8.2. Структура стабильной и метастабильной воды. Сравнение с тетраэдрической сеткой .....	109
8.2.1. Модели .....	110
8.2.2. Анализ топологических характеристик .....	110
8.2.3. Анализ метрических характеристик .....	113
8.3. Анализ симплексов Делоне .....	116
8.3.1. Метрика симплексов Делоне .....	116
8.3.2. Меры формы симплексов Делоне .....	119
8.4. Структура плотных упаковок сферических частиц .....	122
<b>9. Порядок на средних масштабах (средний порядок) .....</b>	<b>123</b>
9.1. Подходы и терминология теории перколяции .....	124
9.2. Структурные мотивы на сетке Вороного .....	125
9.2.1. <i>T</i> -окраска .....	126
9.2.2. <i>O</i> -окраска .....	128
9.2.3. <i>S</i> -окраска .....	131
9.3. Области структурной неоднородности в аморфном аргоне. Анализ сетки Вороного .....	132
9.3.1. Модель .....	132
9.3.2. Области совершенной и несовершенной структур .....	133
9.4. Структурные мотивы на сетке Делоне .....	136
9.4.1. Универсальные структурные неоднородности в простых стеклах .....	136
9.4.2. Распределение свободного объема в жидкости и стекле .....	140
9.5. Геометрические аспекты стеклования .....	143
КОМПЬЮТЕРНАЯ ПОРОМЕТРИЯ .....	147
<b>10. Проблема структуры пор .....</b>	<b>147</b>
10.1. Характеристики полостей .....	148
10.1.1. Радиусы интерстициальных сфер .....	148
10.1.2. Простейшие и составные поры .....	150
10.2. Перколяционная задача связей на навигационной карте .....	152
<b>11. Некоторые физические приложения .....</b>	<b>153</b>
11.1. Нахождение доступного объема для пробной частицы .....	153
11.1.1. “Метод симплексов Делоне” .....	155
11.1.2. Замечания о нахождении доступного пространства в сложных системах .....	157
11.2. Радиальная функция распределения и структурный фактор интерстициальных сфер .....	158
11.2.1. Модели .....	159
11.2.2. Анализ пустот .....	160
11.3. Трехмерная упаковка Аполлония .....	162
11.3.1. Процедура построения упаковки .....	163
11.3.2. Модели .....	164
11.3.3. Фрактальные свойства .....	165
11.3.4. Сверхплотные упаковки сферических частиц .....	168

11.4. Иерархия пор в плотных и рыхлых упаковках .....	170
11.4.1. Модели .....	171
11.4.2. Представление пор .....	173
11.4.3. Анализ симплициальных полостей .....	173
11.4.4. Интегральный анализ пор .....	174
11.4.5. Дифференциальный анализ пор .....	175
11.5. Проницаемость и диффузия .....	177
11.5.1. Проницаемость и протекание .....	177
11.5.2. Диффузия как случайное блуждание на сетке Вороного .....	180
11.6. Анализ пустого пространства в сложных системах .....	185
11.6.1. Полидисперсные и молекулярные системы .....	185
11.6.2. Система прямых линий .....	186
ПРИЛОЖЕНИЕ. Выпуклые многогранники .....	189
ЛИТЕРАТУРА .....	194



Научное издание

**Николай Николаевич Медведев**

**МЕТОД ВОРОНОГО—ДЕЛОНЕ В ИССЛЕДОВАНИИ  
СТРУКТУРЫ НЕКРИСТАЛЛИЧЕСКИХ СИСТЕМ**

Редактор *Н.А. Лившиц*

Технический редактор *О.М. Вараксина*

Корректор *В.В. Борисова*

Компьютерная верстка *С.Ю. Аригольд*

---

ЛР № 020909 от 01.09.99. Подписано в печать 23.12.99. Формат 70×100/16. Печать  
офсетная. Усл.печ.л. 17,25. Уч.-изд.л. 15. Тираж 350 экз. Заказ № 171.

---

Научно-издательский центр ОИГГМ СО РАН  
630090, Новосибирск, просп. Акад. Коптюга, 3