

## ЛИТЕРАТУРА

1. Mahoney M.S. Rene Descartes. *Le Monde, ou Traité de la lumière* (Translation and introduction). N. Y.: Arabic Book, 1979.
2. Okabe A., Boots B., Sugihara K. *Spatial Tessellations. Concepts and Applications of Voronoi Diagrams*. N. Y.: John Wiley and Sons, 1992.
3. Gauss G.F. Recursion der Untersuchungen über die Eigenschaften der positiven ternären quadratischen Formen von Ludwig August Seeber // *J. Reine Andew. Math.* 1840. V. 20. S. 312—320.
4. Dirichlet G.L. Über die Reduction der positiven quadratischen Formen mit drei unbestimmten ganzen Zahlen // *Ibid.* 1850. V. 40. S. 209—227.
5. Voronoi G.F. Nouvelles applications des paramètres continus à la théorie des formes quadratiques. Deuxième Mémoire: Recherches sur les paralloloèdres primitifs // *Ibid.* 1908. V. 134. S. 198—287; 1909. V. 136. S. 67—181.
6. Вороной Г.Ф. Исследования о примитивных параллелопедах // Собр. соч. Т. 2. Киев: Изд-во АН УССР, 1952. С. 239—368.
7. Niggli R. Die topologische Strukturanalyse // *Z. Kristallograph.* 1927. V. 65. S. 391—415.
8. Wigner E., Seitz F. On the constitution of metallic sodium // *Phys. Rev.* 1933. V. 43. P. 804—810.
9. Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. М.: Наука, 1978.
10. Thissen A.H. Precipitation average for large area // *Monthly Weather Rev.* 1911. V. 39. P. 1082—1084.
11. Horton R.E. Rational study of rainfall data makes possible better estimates of water yield // *Engng News-Record.* 1917. V. 79. P. 211—213.
12. Brown G.S. Point density in stems per acre // *New Zealand Forestey Service Research Notes.* 1965. V. 38. P. 1—11.
13. Aurenhammer F. Voronoi diagrams — a survey of a fundamental geometric data structure // *ACM Computing Surveys.* 1991. V. 23 (3). P. 345—405.
14. Препарата Ф., Шеймос М. Вычислительная геометрия: Введение. М.: Мир, 1989.
15. Конвей Дж., Слоэн Н. Упаковки шаров, решетки и группы. Т. 1, 2. М.: Мир, 1990.
16. Voronoi's impact on modern science. Book 1, 2 / Ed. P. Engel, H. Syta / Institute of Math. Kiev, 1998. (In English).

17. Fedorov E.S. Elemente der Lehre von den Figuren // Verh. Russ. Min. Ges. 1885. V. 21. S. 1—279.
18. Александров А. Д. Борис Николаевич Делоне. К 90-летию со дня рождения // Природа. 1980. Т. 3. С. 25—35.
19. Фадеев Д. К., Долбилин Н. П., Рышков С. С., Штогрин М. И. Борис Николаевич Делоне (О жизни и творчестве) // Тр. Матем. ин-та АН СССР им. В. А. Стеклова. 1991. Т. 196. С. 3—10.
20. Делоне Б.Н. Петербургская школа теории чисел. М.; Л.: Изд-во АН СССР. 1947. С. 196—316.
21. Delaunay B.N. Sur la sphere vide // Proc. of the Int. Math. Congress in Toronto, Aug. 11—16, 1924. Toronto: Univ. of Toronto press., 1928. P. 695—700. См. также Delaunay B.N. Sur la sphere vide // Бюллетень АН СССР, класс. науки, мат., ест., 1934. С. 793—800.
22. Делоне Б.Н. Геометрия положительных квадратичных форм. Ч. I / Успехи мат. наук. 1937. Вып. 3. С. 16—62; 1938. Вып. 4. С. 102—164.
23. Роджерс К. Укладки и покрытия. М.: Мир, 1968.
24. Richards F.M. Interpretation of the protein structures: Total volume, group volume distributions, and packing density // J. Mol. Biol. 1974. V. 82 (1) P. 1—14.
25. Richards F.M. Areas, volumes, packing, and protein structure // Ann. Rev. Biophys., Bioeng. 1977. V. 6. P. 151—176.
26. Richards F.M. Calculation of molecular volumes and areas for structures of known geometry // Methods in Enzymology. 1985. V. 115. P. 440—464.
27. Gellatly B.J., Finney J.L. Characterisation of models of multicomponent amorphous metals: the radical alternative to the Voronoi polyhedron // J. Non-Cryst. Solids. 1982. V. 50. P. 313—329.
28. Fisher W., Koch E. Geometrical packing analysis of molecular compounds // Z. Kristallogr. 1979. V. 150, N 1/4. P. 248—260.
29. Oger L., Richard P., Troadec J.P., Gervois A. “Stereological analysis”: comparison between a tessellation of the 2D cut of a sphere packing and 2D cut of a 3D Voronoi tessellation // EPJ. 1999, in press.
30. Underwood E.E. Quantitative stereology. Massachusetts: Addison-Wesley, 1970.
31. Stoyan D., Kendall W.S., Mecke J. Stochastic Geometry and its Applications. N.Y.: John Wiley and Sons, 1987.
32. Полухин В.А. Статистико-геометрический анализ аморфных сплавов металлическо-металлоид // Статистическое моделирование структуры двухкомпонентных аморфных тел / УНЦ АН СССР. Свердловск, 1984. С. 18—36.
33. Annic C., Troadec J.P., Gervois A. et al. Experimental study of radical tessellation of assemblies of discs with size distribution // J. Phys. I. (France). 1994. V. 4 (1). P. 115—125.
34. Мусхелишвили Н.И. Курс аналитической геометрии. М.; Л.: Гос. изд-во тех.-теор. лит., 1947.

35. Lee D.T., Drysdale R.L. Generalization of Voronoi diagrams in the plane // SIAM J. Comput. 1981, V. 10, P. 73—87.
36. Johnson W.A., Mehl R.F. Reaction kinetics in processes of nucleation and growth // Trans. Amer. Inst. Min. Metall. and Petroleum Engineers. 1939, V. 135, P. 416—442.
37. Fanfoni M., Tomellini M. The Johnson-Mehl-Avrami-Kolmogorov model. a brief review // Nuovo Cimento. 1998, v. 20D (7—8), P. 1171—1182.
38. Kashchiev D., Sato K. Kinetics of crystallization preceded by metastable-phase formation // J. Chem. Phys. 1998, V. 109 (19), P. 8530—8540.
39. Hermann H., Mattern N., Roth S., Uebele P. Simulation of crystallization processes in amorphous iron-based alloys // Phys. Rev. B. 1997, V. 56 (21), P. 13888—13897.
40. Chiu S.N. Limit theorems for the time of complections of Johnson-Mehl tessellation // Adv. Appl. Prob. (SGSA), 1995, V. 27, P. 889—910.
41. Heinrich L., Schüle E. Generation of the typical cell of a non-poissonian Johnson-Mehl tessellation // Commun. statist.-stochastic models. 1995, V. 11(3), P. 541—560.
42. Frost H.J. Thompson C.V. The effect of nucleation condition of the topology and geometry of two-dimensional grain structure // Acta. Metall. 1987, V. 35, P. 529—540.
43. Möller J. Random Johnson-Mehl tessellation // Adv. Appl. Prob. 1992, V. 24, P. 814—844.
44. Fitzpatrick S. Metric projections and differentiability of distance function // Bull. Austral. Math. Soc. 1980, V. 22, P. 291.
45. Foote R. L. Regularity of distance functions // Proc. Am. Math. Soc. 1984, V. 92, P. 153.
46. Luchnikov V. A., Medvedev N. N., Oger L., Troadec J.-P. The Voronoi—Delaunay analysis of voids in systems of nonspherical particles // Phys. Rev. E. 1999, V. 59(6), P. 7205—7212.
47. Green P.J., Sibson R. Computing Dirichlet tessellations in the plane // The Comp. J. 1978, V. 21 (3), P. 162—167.
48. Bowyer A. Computing Dirichlet tessellations // Ibid. 1981, V. 24 (2), P. 162—166.
49. Watson D.F. Computing the  $n$ -dimensional Delaunay tessellation with application to Voronoi polytopes // Ibid. 1981, V. 24 (2), P. 167—172.
50. Fortune S. A sweeping algorithm for Voronoi diagrams // Algorithmica. 1987, V. 2 (2), P. 153—174.
51. Dwyer R.A. A faster divide-and-conquer algorithm for constructing Delaunay triangulation // Ibid. 1987, V. 2 (2), P. 137—151.
52. Софронов И.Д., Урм В.Я. О решении уравнений акустики и теплопроводности методом конечных разностей на нерегулярных сетках // Комплект программ математической физики. Новосибирск, 1972. С. 79—86.
53. Braun J., Sambridge M. A numerical method for solving partial differential equations on highly irregular evolving grids // Monthly Nature. 1995, V. 3, N 8(32), P. 73—78.

54. Sloan D.J. A fast algorithm for constrating Delaunay triangulation in the plane // Adv. Eng. Software (G.B.). 1987. V. 9 (1). P. 34—55.
55. Галицкий В.В., Мироненко Е.В. Мозаика Вороного на плоскости. Алгоритм построения // Материалы по мат. обеспечению ЭВМ. № 6. Пущино, 1981. С. 25.
56. Devijver P.A., Dekesel M. Computing multidimensional Delaunay tessellation // Patt. Recog. Lett. 1983. V. 1. P. 311—316.
57. Brostow W., Dussaut J.-P., Fox L. Construction of Voronoi polyhedra // J. of Comput. Phys. 1978. V. 29. P. 81—92.
58. Finney J.L. A procedure for the construction of Voronoi polyhedra // Ibid. 1979. V. 32. P. 137—143.
59. Tanemura M., Ogawa T., Ogita N. A new algorithm for three-dimensional Voronoi tessellation // Ibid. 1983. V. 51. P. 191—207.
60. Medvedev N.N. The algorithm for three-dimensional Voronoi polyhedra // Ibid. 1986. V. 67. P. 223—229.
61. Anishchik S. V., Medvedev N. N. Three-dimentional Apollonian packing as a model for dense granular systems // Phys. Rev. Lett. 1995. V. 75, (23). P. 4314—4317.
62. Berger M. Géométrie. V. 2: Espaces euclidiens, triangles, cercles et sphères. Paris: CEDIC, 1978.
63. Strang G. Introduction to applied mathematics. Wellesley: Cambridge press, 1986.
64. Wright F. C., Connell G. A., Allen J. W. Amorphography and the modelling of amorphous solid structures by geometric transformations // J. Non-Cryst. Solids. 1980. V. 42. P. 69—86.
65. Physics of simple liquids / Ed. H. N. V. Temperley, J. S. Rowlinson, G. S. Rushbrooke. Amsterdam: Nort-Holland Pub. Company. 1968. (Русский перевод: Физика простых жидкостей (статистическая теория). Под ред. Г. Темперли, Дж. Роульсона, Дж. Рашибрука. М.: Мир, 1971.)
66. Croxton C. A. Liquid state physics — a statistical mechanical introduction. Cambridge Univ. Press, 1974. (Русский перевод: К. Крокстон, Физика жидкого состояния. Статистическое введение. М.: Мир. 1978.)
67. Debye P., Scherrer P. Interferenzen an regellos orienteren. Teilchenim Röntgenlicht 1 // Nachr. Ges. Wiss. Gottingen: Math. Physik. V.1. 1916. S. 1—15.
68. Френкель Я.И. Кинетическая теория жидкостей. Л.: Наука, 1975.
69. Prins J.A., Petersen H. Patterns corresponding to some simple types of molecular arrangement in liquid // Phys. 1936. V. 3. P. 147.
70. Franchetti S. On a Model for Monoatomic Liquids // Nuovo Cimento. 1968. V. 55B. P. 335.
71. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I. Asymptotic oscillation of the radial distribution function in quasi-Cristalline model of Liquids // Phys. stat. sol.(b). 1977. V. 83. P. 405.
72. Baer S. Form of the radial distribution function and the structure factor, derived from the “structural diffusion” model of liquids // Physica. 1977. V. 87A. P. 569; 1978. V. 91A. P. 603.

73. Bernal J.D. The Bakerian lecture, 1962. The structure of liquids // Proc. Roy. Soc. London. 1964. V. A280. P. 299—320.
74. Бернал Дж., Кинг С. Экспериментальное моделирование простых жидкостей // Физика простых жидкостей. М.: Мир, 1971. С. 116—135.
75. Bernal J.D. The structure of liquids // Sci. Amer. 1960. V. 203. P. 124. (Русский перевод: Дж. Бернал. Структура жидкостей // Над чем думают физики. Вып. 5: Квантовая микрофизика / Ред. Д.А. Миртова. М., 1967.)
76. Bernal J.D. A geometrical approach to the structure of liquids // Nature. 1959. V. 183 (4655). P. 141—147.
77. Наберухин Ю.И. Что такое структура жидкости // ЖСХ. 1981. Т. 22 (6). С. 62—80.
78. Наберухин Ю.И. Структурные модели жидкостей / НГУ. Новосибирск, 1981.
79. Whittaker E.J. The cavities in a random close-packed structure // J. Non. Cryst. Solids. 1978. V. 28 (1). P. 293—304.
80. Frost H.J. Hole statistics in dense random packings // Technical report N. 6. Cambridge (Mass.): Harvard Univ., 1978.
81. Ahmadzadeh M., Cantor B. Interstitial structure and diffusion in DRP metallic glasses // J. Non-Cryst. Solids. 1981. V. 43 (1). P. 189—219.
82. Rahman A. Liquid structure and self-diffusion // J. Chem. Phys. 1966. V. 45. P. 2585.
83. Finney J.L. Random packings and the structure of simple liquids. I. The geometry of random close packing // Roy. Soc. London. 1970. V. 319. P. 479—494.
84. Finney J.L. Random packings and the structure of simple liquids. II. The molecular geometry of simple liquids // Ibid. 1970. V. 319. P. 495—507.
85. Tanemura M., Hiwatari Y., Matsuda H. et al. Geometrical analysis of crystallization of the soft-core model // Prog. Theor. Phys. 1977. V. 58. P. 1079—1095.
86. Hsu C.S., Rahman A.J. Crystal nucleation and growth in liquid rubidium // J. Chem. Phys. 1979. V. 70. P. 5234—5240.
87. Hsu C.S., Rahman A.J. Interaction potentials and their effects on crystal nucleation and symmetry // Ibid. 1979. V. 71. P. 4974—4996.
88. Yonesawa F. Modelling of the rapid quenched process at constant pressure // Phys. Soc. Japan. 1982. V. 44. P. 220—227.
89. Tanaka M. Statistics of Voronoi polyhedra in rapidly quenched monoatomic liquids. II. Comparison between argon and rubidium // Ibid. 1986. V. 55. P. 3428—3436.
90. Галашев А.Е., Скрипов В.П. Изучение структуры переохлажденного аргона // Физика низких температур. 1980. Т. 6 (9). С. 1106—1111.
91. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Структурные превращения в жидких металлах: аллюминий, железо // Докл. АН СССР. 1981. Т. 257 (3). С. 604—607.
92. Скрипов В.П., Галашев А.Е. О различиях структур ближнего порядка кристалла и жидкости // Кристаллография. 1982. Т. 27. С. 961.

93. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И. Многогранники Вороного нерегулярных упаковок. Ч. 1. Анализ возмущенных кристаллических упаковок // ЖСХ. 1985. Т. 26 (3). С. 59—67.
94. Волошин В.П., Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И. Многогранники Вороного нерегулярных упаковок. Ч. 2. Простые жидкости // Там же. С. 68—76.
95. Полухин В.А., Ватолин Н.А. Моделирование аморфных металлов. М.: Наука, 1985.
96. Kimura M., Yonezawa F. Nature of amorphous and liquid structure — computer simulation and statistical geometry // J. Non-Cryst. Solids. 1984. V. 61—62. P. 535.
97. Hiwatari Y., Saito T., Ueda A. Structural characterisation of soft-core and hard-core glasses // J. Chem. Phys. 1984. V. 81. P. 6044—6050.
98. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И. Симплексы Делоне простых жидких и аморфных веществ // Докл. АН СССР. 1986. Т. 288, (5). С. 1104—1107.
99. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I. Structure of simple liquids as a percolation problem on the Voronoi network // J. Phys. A: Math. Gen. 1988. V. 21. P. L247—L252.
100. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И. Структура простых жидкостей как перколяционная проблема на сетке Вороного // ЖСХ. 1989. Т. 30(2). С. 98—105.
101. Metropolis N., Rosenbluth A.W., Rosenbluth M.N. et al. Equation of state calculations by fast computing machines // J. Chem. Phys. 1953. V. 21. P. 1087—1092.
102. Белащенко Д.К., Менделев М.И. Силовой алгоритм реконструкции атомных моделей двухкомпонентных аморфных сплавов по дифракционным данным // Расплавы. 1993. Т. 1. С. 46—51.
103. Iparraguirre E.W., Sietsma J., Thijssse B.J., Pusztai L. A Reverse Monte Carlo study of amorphous  $^{81}\text{Ni}/^{19}\text{B}$  // Computational Materials Science. 1993. V. 1 (2). P. 110—122.
104. Замалин В.М., Норман Г.Э., Филинов В.С. Метод Монте-Карло в статистической термодинамике. М.: Наука, 1977.
105. Вуд В.В. Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло // Физика простых жидкостей. Ч. 2. М.: Мир, 1971. С. 275—301.
106. Методы Монте-Карло в статистической физике / Ред. К. Биндер. М.: Мир, 1982.
107. Frenkel D., Smit B. Understanding Molecular Simulation. From Algorithms to Applications. N.Y.: Academic Press. 1996.
108. Binder K. The Monte Carlo Method in Condensed Matter Physics. Berlin: Springer, 1992.
109. Alder B.J., Weinwright T.E. Phase transition for a hard sphere system // J. Chem. Phys. 1957. V. 27. P. 1208—1209.
110. Rahman A.J. Correlation in the motion of atoms in liquid argon // Phys. Rev. 1964. V. 136A. P. 405—411.
111. Verlet L. Computer experiment on classical fluids. I. Thermodynamical properties // Ibid. 1967. V. 159. P. 98—103.

112. Verlet L. Computer experiment on classical fluids. II. Equilibrium correlation functions // *Ibid.* 1968. V. 165. P. 201—214.
113. Allen M.P., Tildesley D.J. Computer simulation of liquids. Oxford: Clarendon Press, 1987.
114. Haile J.M. Molecular Dynamics Simulation. Elementary Method // N. Y.: John Wiley and Sons, 1992.
115. Vesely F.J. Computational Physics. An Introduction. N. Y.: Plenum, 1994.
116. Метод молекулярной динамики в физической химии / Ред. Ю.К. Товбин. М.: Наука, 1996.
117. Bennett C.H. Serially deposited amorphous aggregates of hard spheres // *J. Appl. Phys.* 1972. V. 43. P. 2727—2734.
118. Powell M.J. Computer simulated random packings of spheres // *Powder Techn.* 1980. V. 25. P. 45—52.
119. Jodrey W. S., Tory E.M. Computer simulation of isotropic, homogeneous, dense random packing of equal spheres // *Ibid.* 1981. V. 30. P. 111—118.
120. Jullien R., Meakin P., Pavlovitch A. Growth of packings // *Disorder and granular media* / Ed. D. Bideau, A. Hansen. Elsevier Science Publishers B.V., 1993. P. 103—131.
121. Jodrey W. S., Tory E.M. Computer simulation of close random packing of equal spheres // *Phys. Rev. A*. 1985. V. 32 (4). P. 2347—2351.
122. Aparicio N. D., Cocks A. C. F. The representation of random packings of spheres for sintering simulations // *Acta Metallurgica et Materialia*. 1995. V. 42 (10). P. 3873—3884.
123. Herrmann H. J. Simulation of granular media // *Physica A*. 1992. V. 191. P. 263—276.
124. Dippel S., Batroni G. G., Wolf D.E. Collision-induced friction in the motion of single particle on a bumpy inclined line // *Phys. Rev. E*. 1996. V. 54 (6). P. 6845—6856.
125. Schafer J., Dippel S., Wolf D.E. Force schemes in simulation of granular materials // *J. Phys. I (France)*. 1996. V. 6. P. 5—20.
126. Oger L., Gervois A., Troadec J.P., Rivier N. Voronoi tessellation of packings of spheres: topological correlation and statistics // *Philosophical Mag. B*. 1996. V. 74 (2). P. 177—197.
127. Spedding P. L., Spencer R.M. Simulation of packing density and liquid flow fixed beds II. Voronoi polyhedra studies // *Comput. Chem. Eng.* 1998. V. 22 (1—2). P. 247—257.
128. Aoki M.I., Tzumuraya K. Ab initio molecular dynamic studies of volume stability of Voronoi polyhedra under pressures in metal glass // *J. Chem. Phys.* 1996. V. 104 (17). P. 6719—6723.
129. Jund P., Caprion D., Jullien R. Local investigation of the glass transition — molecular dynamics and Voronoi tessellation // *Europhysics Lett.* 1997. V. 37 (8). P. 547—552.
130. Jund P., Caprion D., Jullien R. The glass transition in a simple model glass: numerical simulations // *Mol. Simulation*. 1997. V. 20 (1—2). P. 3—15.
131. Kinney K.E., Xu S. M., Bartel L.S. Molecular dynamics study of the freezing of clusters of chalcogen hexafluorides // *J. Phys. Chem.* 1996. V. 100 (17). P. 6935—6941.

132. Tsumuraya K. Voronoi polyhedron analyses in metal liquids and glasses // Voronoi's impact on modern science. Book 2 / Ed. P. Engel, H. Syta / Inst. of Math. Kiev, 1998. P. 176—185.
133. Okabe I., Tanaka H., Nakanishi K. Structure and phase transitions of amorphous ices // Phys. Rev. A. 1996. V. 53 (3). P. 2638—2647.
134. Liska M., Perichta P., Hatalova B. The structure of molecular dynamics simulated oxide glasses viewed through Voronoi polyhedra tessellation // J. Non-Chryst. Sol. 1995. V. 193. P. 249—252.
135. Vessal B., Amini M., Catlow C. R. A. Simulation and characterization of the structure of vitreous silica // Mol. Simulation. 1995. V. 15 (2). P. 123—127.
136. David E. E., David C. W. Voronoi polyhedra as a tool for studying solvation structure // J. Chem. Phys. 1982. V. 76 (9). P. 4611—4614.
137. Gelchinski B.R., Mirzoev A.A., Verkerk P., Vyatkin G.P. Change of short-range order in liquid Li-S as function of composition: application of the Voronoi polyhedra method // LAM-10. Book of abstracts. 1998. P. 88.
138. Melnick A.B., Shpack A.P. Structural modeling of  $\text{Co}_{81}\text{P}_{19}$  amorphous alloy // Phys. Status. Solidi B. 1997. V. 200 (2). P. 395—403.
139. Thomas N.W. An extantion of the Voronoi analysis of crystal structures // Acta Cryst. B Structure Sci. 1996. V. 52 (6). P. 939—953.
140. Liska M., Perichta P., Nagy L.T. The structure of MD simulated cryolite melt // J. Non-Cryst. Sol. 1995. V. 193. P. 309—311.
141. Blatov V.A., Serezhkin V.N. Structural and topological features of oxygen-containing zirconium(IV) compounds // J. of Coord. Chem. 1997. V. 23 (4). P. 177—181.
142. Maret M., Lancon F., Billard E. Local symmetries in liquid  $\text{Al}_{60}\text{Mn}_{40}$  and  $\text{Al}_{71}\text{Pd}_{19}\text{Mn}_{10}$  alloys // J. Phys: Condens. Matter. 1994. V. 6. P. 5791—5804.
143. Mendelev M.I., Ishmaev S.N., Hajdu F., Svab E. J. Partial structure correlations in amorphous  $\text{Ni}_{83}\text{La}_{17}$  // Non-Cryst. Solids. 1998. V. 240 (1—3). P. 35—42.
144. Галашев А.Е. Молекулярно-динамические изменения ОЦК и ГЦК модификаций при кристаллизации переохлажденного натрия // Кристаллография. 1998. Т. 43 (4). С. 739—744.
145. Meijering J.L. Interface area, edge length, and number of vertices in crystal aggregates with random nucleation // Phillips Res. Rep. 1953. V. 8. P. 270—290.
146. Лаврик Н.Л., Волошин В.П. О плотности вероятности распределения ближайших соседних молекул // ЖФХ. 1996. Т. 70 (6). С. 1140—1142.
147. Polk D.E. Structural model for amorphous silicon and germanium // J. Non-Cryst. Solids. 1971. V. 5. P. 365—376.
148. Polk D.E., Boudreaux D.S. Tetrahedrally coordinated random-network structure // Phys. Rev. Lett. 1973. V. 31. P. 92—95.
149. Гайгер А., Наберухин Ю.И., Медведев Н.Н. Структура стабильной и метастабильной воды. Анализ многогранников Вороного // ЖСХ. 1992. Т. 33 (2). С. 79—87.

## Литература

---

150. Troadec J.P., Gervois A., Oger L. Statistic of Voronoi cells of slightly perturbed face centered cubic and hexagonal close-packed lattices // *Europhys. Lett.* 1998. V. 42 (2). P. 167—172.
151. Барановский Е.П. О минимумах плотности решеточного покрытия пространства равными шарами // Уч. зап. Иванов. гос. пед. ин-та. 1963. Т. XXXIV. С. 71—76.
152. Акимова И.Я. Задача оптимального размещения и обобщение одной теоремы Фейеша Тота // *Изв. АН СССР. Техническая кибернетика.* 1982. Т. 2. С. 224—228.
153. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I., Voloshin V.P. Local environmental geometry of atoms in the Lennard-Jones system // *Mater. Chem. and Phys.* 1986. V. 14. P. 533—548.
154. Tzumuraya K., Ishabashi K., Kusuniki K. Statistics of Voronoi polyhedra in a model silicon glass // *Phys. Rev. B.* V. 47. P. 8552—8557.
155. Медведев Н.Н., Волошин В.П., Наберухин Ю.И. К вопросу об икосаэдрической координации атомов в простых жидкостях // *ЖСХ.* 1986. Т. 27 (4). С. 91—97.
156. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И., Волошин В.П. Об икосаэдрических и кристаллических координациях атомов в простых жидкостях // *Расплавы.* 1987. Т. 1, вып. 1. С. 22—29.
157. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И. Исследование структуры простых жидкостей и аморфных тел методами статистической геометрии // *ЖСХ.* 1987. Т. 28 (3). С. 117—132.
158. Гильберт Д., Кон-Фоссен С. Наглядная геометрия. М.: Наука, 1981.
159. Chiu S.N. Aboav-Wear's and Lewis' Laws — A Review // *Materials Characterization.* 1995. V. 34. P. 149—165.
160. Aboav D.A. The arrangement of grains in polycrystals // *Metallography.* 1970. V. 3. P. 383—390.
161. Kumar S., Kurtz S.K., Banavar J.R., Sharma M.G. Properties of a three-dimensional Poisson-Voronoi tessellation: A Monte Carlo Study // *J. of Stat. Phys.* 1992. V. 67 (3/4). P. 523—551.
162. Гайнутдинов И.И., Павлюхин Ю.Т. Система частиц Леннарда-Джонса в условиях интенсивной пластической деформации // *Докл. РАН.* 1999. Т. 364 (2). С. 203—206.
163. Brostow W., Chybicki M., Laskowski P., Rybicki J. Voronoi polyhedra and Delaunay simplexes in the structural analysis of molecular-dynamics-simulated materials // *Phys. Rev. B.* 1998. V. 57 (21). P. 13448—13452.
164. Glazov V.M., Pavlova L.M., Rezontov K.B. Specific features of the liquid silicon structure studied by the methods of statistical geometry // *Kristallografiya.* 1998. V. 43 (4). P. 671—676.
165. Волошин В.П., Наберухин Ю.И. О происхождении расщепления второго максимума в радиальной функции распределения аморфных твердых тел // *ЖСХ.* 1997. Т. 38 (1). С. 78—88.
166. Лаврик Н.Л., Волошин В.П. Расчет средних расстояний между случайно распределенными частицами в модели точек и твердых сфер // *ЖФХ.* 1999. Т. 73 (4). С. 710—713.

167. Эйзенберг Д., Кауцман В. Структура и свойства воды. Л.: Гидрометеоиздат, 1975.
168. Маленков Г. Г. Структура водных систем. Модели и численный эксперимент: Дисс. ...д-ра хим. наук. М., 1990.
169. Маленков Г.Г., Тытик Д.Л. Динамика сеток водородных связей в жидкой воде по данным численного эксперимента // Метод молекулярной динамики в физической химии / Ред. Ю.К. Товбин. М.: Наука. 1996. С. 204—234.
170. Geiger A., Mausbach P., Schnitker J. Water and Aqueous Solutions / Ed. G.W. Neilson, J.E. Enderby. Bristol: A. Hilder, 1986. P. 15—30.
171. Бокий Г.Б. Кристаллохимия. М.: Изд-во МГУ, 1960.
172. Вайнштейн Б.К. Современная кристаллография. Т. 1. М.: Наука, 1979.
173. Muche L. Distributional properties of the three-dimentional Poisson Delaunay Cell // J. Stat. Phys. 1996. V. 84 (1—2). P. 147—167.
174. Miles R. E. A synopsis of “Poisson flats in Euclidean space” // Stochastic Geometry / Ed. E.F. Harding, D.G. Kendall. N.Y.: John Wiley and Sons, 1974.
175. Möller J. Random tessellation in  $R^d$  // Adv. Appl. Probl. 1989. V. 21. P. 37—73.
176. Rathie P. N. On the volume distribution of the typical Poisson-Delaunay cell // Ibid. 1992. V. 29. P. 740—744.
177. Kumar S., Kurtz S.K. A Monte Carlo study of size and angular properties of a three-dimensional Poisson-Delaunay cell // J. Stat. Phys. 1994. V. 75 (3-4). P. 736—748.
178. Voloshin V.P., Naberukhin Yu.I., Medvedev N.N. Can varios classes of atomic configurations (Delaunay simplices) be distinguished in random dense packings of spherical particles? // Molecular Sim. 1989. V. 4. P. 209—227.
179. Полухин В.А., Дзугутов М.М. Статистико-геометрический анализ структуры молекулярно-динамической модели аморфного и жидкого алюминия // Физика металлов и металловедение. 1981. т. 51. С. 64.
180. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I. Shape of the Delaunay simplices in dense random packings of hard and soft spheres // J. Non-Chryst. Solids. 1987. V. 94. P. 402—406.
181. Медведев Н.Н., Волошин В.П., Наберухин Ю.И. Изучение формы атомных конфигураций в плотных леннард-джонсовских системах // ЖСХ. 1987. Т. 28 (2). С. 62—69.
182. Medvedev N. N. Aggregation of tetrahedral and quartoctahedral Delaunay simplices in liquid and amorphous rubidium // J. Phys. Condens. Matter. 1990. V. 2. P. 9145—9154.
183. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И., Лучников В.А. Области “совершенной” структуры в аморфном аргоне // ЖСХ. 1994. Т. 35 (1). С. 53—63.
184. Stillinger F.H., Weber T.A. Hidden structure in liquids // Phys. Rev. 1982. V. A25. P. 978—991.
185. Наберухин Ю.И., Волошин В.П., Медведев Н.Н. Собственные структуры конденсированных сред. Машинное моделирование леннард-джонсовских систем // Расплавы. 1987. Т. 1, вып. 2. С. 71—77.

186. Yarnell K., Katz M.I., Wenzel R.G., Koenig S.H. Structure factor and radial distribution function for liquid argon at 85 K // Phys. Rev. 1973. V. A7. P. 2130.
187. Эфрос А.Л. Физика и геометрия беспорядка. Вып. 19. М.: Наука, 1982.
188. Naberukhin Yu.I., Voloshin V.P., Medvedev N.N. Geometrical analysis of the structure of simple liquids: percolation approach // Molec. Phys. 1991. V. 73 (4). P. 917—936.
189. Boerdijk A.H. Some remarks concerning close-packing of equal spheres // Phillips Res. Rep. 1952. V. 7. P. 303—313.
190. Luchnikov V.A., Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I., Novikov V.N. Inhomogeneity of the spatial distribution of vibrational modes in a computer model of amorphous argon // Phys. Rev. B. 1995. V. 51. P. 15569—15572.
191. Jackle J. Amorphous Solids: Low-Temperature Properties. N.Y.: Springer, 1981.
192. Malinovsky V.K., Novikov V.N., Sokolov A.P. // Advanced Solid State Chemistry / Ed. M. Frumar, V. Cherny, L. Tichy. Amsterdam: Elsevier, 1989.
193. Elliott S. R. The origin of the first sharp diffraction peak in the structure factor of covalent glasses and liquids // J. Phys.: Condens. Matter. 1992. V. 4. P. 7661—7678.
194. Luchnikov V.A., Medvedev N.N., Appelhagen A., Geiger A. Medium-range order of amorphous silicon studied by the Voronoi—Delaunay method // Mol. Phys. 1996. V. 88. P. 1337—1348.
195. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И., Лучников В.А. Локализация колебательных мод на неоднородностях структуры в компьютерной модели аморфного аргона // ЖФХ. 1995. Т. 69 (1). С. 33—37.
196. Rahman A., Mandell M.J., McTague J.P. Molecular Dynamics study of an amorphous Lennard-Jones system at low temperature // J. Chem. Phys. 1976. V. 64. P. 1564—1568.
197. Schober H.R., Laird B.B. Localized low-frequency vibrational modes in glasses // Phys. Rev. B. 1991. V. 44. P. 6746.
198. Cohen M.H., Grest G.S. Liquid-glass transition, a free-volume approach // Phys. Rev. B. 1979. V. 20. P. 1077—1098.
199. Kotelyansky M.I., Mazo M.A., Grintsov A.G., Oleynik E.F. // Phys. stat. sol. B. 1991. V. 166. P. 25—34.
200. Волошин В.П., Наберухин Ю.И., Медведев Н.Н., Му Шик Дж. О переколяционном характере фазового перехода жидкость—аморфное твердое тело // ЖСХ. 1995. Т. 36 (3). С. 473—480.
201. Voloshin V.P., Naberukhin Yu.I., Medvedev N.N., Mu Shik J. Investigation of free volume percolation under the liquid-glass phase transition // J. Chem. Phys. 1995. V. 102. P. 4981—4986.
202. Гиршфельдер Дж., Кертисс Ч., Берд Р. Молекулярная теория газов и жидкостей. М.: ИЛ, 1961.
203. Mu Shik Jh., Eyring H. A model of liquid state, three phase partition function // Theoretical Chemistry: Advances and Perspectives. V. 3. N.Y.: Academic press, 1978. P. 55—141.

204. Medvedev N.N., Geiger A., Brostow W. Distinguishing liquids from amorphous solids: Percolation analysis on the Voronoi network // J. Chem. Phys. 1990. V. 93 (11). P. 8337—8342. .
205. Медведев Н.Н., Наберухин Ю.И., Волошин В.П. О связи текучести и структуры. Анализ молекулярно-динамической модели жидкого и аморфного рубидия // ЖФХ. 1992. Т. 66 (1). С. 163—166.
206. Tanaka M. Molecular-dynamics study of the structure of a rapidly quenched metal // J. Phys. Soc. Jap. 1982. V. 52 (12). P. 3802—3809.
207. Medvedev N.N. Computational porosimetry // Voronoi's impact on modern science. Book 2 / Eds P. Engel, H. Syta / Inst. of Math. Kiev, 1998. P. 164—175.
208. Ridgway K., Turbuk K.J. The random packing of spheres // British Chem. Eng. 1967. V. 12 (3). P. 384—388.
209. Haughen D.P., Beveridge G.S.G. Structural properties of packed beds — a review // Canad. J. Chem. Eng. 1969. V. 47. P. 130—140.
210. Dodds J., Leitzelement M. The relation between the structure of packings of particles and their properties // Proc. of the winter school, Les Houches, France, 1985 / Eds N. Boccara, M. Doaud. Berlin: Springer-Verlag, 1985.
211. Mason G. Desaturation of porous media I. Unconsolidated materials // J. Coll. Interface Sci. 1972. V. 41, (2). P. 208—227.
212. Mason G. Mobilisation of oil blobs in the pore space of a random sphere packing // Chem. Eng. Sci. 1983. V. 38, (9). P. 1455—1460.
213. Mason G., Yaday G.D. Capillary hysteresis in the pore space of a packing of spheres measured by the movement of blobs // J. Coll. Interface Sci. 1983. V. 95, (1). P. 120—130.
214. Chan S.K., Ng K.M. Geometry characteristics of pore space in a random packing of equal spheres // Powder Technol. 1988. V. 54. P. 147—155.
215. Smith D.M., Gallegos D.P., Sterner D.L. Mercury porosimetry in random sphere packing: breakthrough pressure and pore structure determination // Ibid. 1987. V. 53. P. 11—22.
216. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I., Voloshin V.P. Geometry of empty space inside of granular system // Proc. of VIth IFP conf. "Physical chemistry of colloids and interfaces in oil production" / Eds H. Toulhoat, J. Lecourtier. Paris, 1992. P. 355—356.
217. Widom B. Some topics in the theory of liquids // J. Chem. Phys. 1963. V. 39. P. 2808—2813.
218. Guissani Y., Guillot B., Sokolic F. Chemical potential of triatomic polar liquids; a computer simulation study // Ibid. 1985. V. 96 (2). P. 271—276.
219. Deitrick G.L., Scriven L.I., Davis H.T. Efficient test molecule sampling in molecular simulation // Mol. Sim. 1992. V. 8. P. 239—243.
220. Ding K., Valleau J.P. Umbrella-sampling realization of Widom chemical potential estimation // J. Chem. Phys. 1993. V. 98, (4). P. 3306—3312.
221. Guillot B., Guissani Y. Computer simulation study of the temperature dependence of the hydrophobic hydration // Ibid. 1993. V. 99 (10). P. 8075—8094.

222. Bieshaar R., Geiger A., Medvedev N.N. Calculation of chemical potentials by a novel Delaunay-Simplex-Sampling technique for particle insertion // Mol. Simulat. 1995. V. 15. P. 189—196.
223. Анищик С. В., Медведев Н. Н. Эффективный метод расчета химического потенциала при компьютерном моделировании жидкостей // Расплавы. 1995. Т. 6. С. 81—85.
224. Medvedev N.N., Klene M., Paschek D., Geiger A. Atom-atom and void-void correlations. complementary sides of the structure // In press.
225. Wilson M., Madden P.A., Medvedev N.N. et al. Voids in network-forming liquids and their influence on the structure and dynamics // J. of the Chem. Soc.—Faraday Transactions. 1998. V. 94 (9). P. 1221—1228.
226. Wilson M., Madden P. Voids, layers and the first sharp difraction peak in  $ZnCl_2$  // Phys. Rev. Lett. 1998. V. 80(3). P. 532—535.
227. Stoyan D., Stoyan H. Exploratory data analysis for planar tessellations: structural analysis and point process models // Appl. Stoch. Models and Data Analys. 1990. V. 6. P. 13—25.
228. Finney J.L., Wallace J. Interstice correlation function: a new, sensitive characterisation of non-crystalline packed structures // J. Non-Cryst. Solids. 1981. V. 43. P. 165—187.
229. Medvedev N.N., Naberukhin Yu.I., Semenova I.Yu. The radial distribution function and structure factor of liquid and amorphous gallium as described by the quasi-crystalline model // Ibid. 1984. V. 64. P. 421—432.
230. Paschek D., Geiger A. Simulation study on the diffusive motion in deeply supercooled water // J. Phys. Chem. 1999. V. B103. P. 4139—4146.
231. Корсунский В.И., Наберухин Ю.И. Качественный анализ радиальных функций распределения воды на основе моделей непрерывной случайной тетраэдрически координированной сетки // ЖСХ. 1982. Т. 23 (3). С. 92—100.
232. Mandelbrot B.B. The fractal geometry of nature. Freeman, 1983.
233. Boyd D.W. The residusl set dimension of the Apollonian packing // Mathematica. 1973. V. 20. P. 170—174.
234. Mantica G. Fractal geometry and computer graphics / Ed. J.L. Encarnaco, et al. Berlin; Heidelberg: Springer-Verlag, 1992. P. 195—200.
235. Herrmann H.J., Mantica G., Bessis D. Space-filling bearings // Phys. Rev. Zett. 1990. V. 65. (26). P. 3223—3226.
236. Brilliantov N.V., Krapivsky P.L., Andrienko Yu.A. Random space-filling-tiling: fractal properties and kinetics // J. Phys. A.: Math. Gen. 1994. V. 27. P. L381—L386.
237. Brilliantov N.V., Andreenko Yu.A., Krapivsky P.L., Kurths J. Fractal formation and ordering in random sequential adsorption // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 76 (21). P. 4058—4061.
238. Ayer J.E., Soppet F.E. Vibratori compaction of spherical shapes // J. Am. Cheram. Soc. 1965. V. 48. P. 180—183.

239. Furnas C.C. The relations between specific volume, void and size composition in systems of broken solids of mixed size // Ind. Eng. Chem. 1931. V. 23. P. 1052—1058.
240. Standish N., Yu A.B., Zou R.P. Optimization of coal grind for maximum bulk density // Powder Techol. 1991. V. 68. P. 175—186.
241. Ouchiyama N., Tanaka T. Porosity estimations of mixed assemblages of solid particles with different packing characteristics // J. Chem. Eng. Japan. 1988. V. 21 (2). P. 157—163.
242. Lam D.C.C., Nakagawa M. Packing of particles. P. 3. Effect of particle size distribution shape on composite packing density of bimodal mixture // Ibid. 1994. V. 102 (2). P. 133—138.
243. Gupta D., Farooq S. Packing density and connectivity of multicomponent powder systems with different particle size distributions // Adv. Powder Metall. Part. Mater. 1992. V. 2. P. 69—83.
244. Furnas C.C. Grading aggregates. I-Mathematical relations for beds of broken solids of maximum density // U.S. Bur. Mines. Rep. Invest. 1928. V. 7. P. 2894.
245. Ouchiyama N., Tanaka T. Predicting the densest packings of ternary and quaternary mixtures of solid particles // Ind. Eng. Chem. Res. 1989. V. 28. P. 1530—1536.
246. Yu A.B., Standish N. Porosity calculations of multicomponent mixtures of spherical particles // Powder Technol. 1987. V. 52. P. 233—241.
247. Дзисько В.А., Карнаухов А.П., Тарасова Д.В. Физико-химические основы синтеза окисных катализаторов. Новосибирск: Наука, Сиб. отд-ние, 1978. С. 231—277.
248. Чизмаджаев Ю.А., Маркин В.С., Тарапевич М.Р., Чирков Ю. Г. Макрокинетика процессов в пористых средах. М.: Наука, 1971.
249. Фенелонов В.Б. Пористый углерод // Ин-т катализа СО РАН. Новосибирск, 1995.
250. Sahimi S. Application of percolation theory. N.Y.: Taylor & Francis, 1994. P. 252.
251. Zhdanov V.P. Application of percolation theory to describing kinetic processes in porous solids // Advances in catalysis. 1993. V. 39. P. 1—49.
252. Волошин В.П., Медведев Н.Н., Фенелонов В.Б., Пармон В.Н. Компьютерная порометрия монодисперсных силикагелей // Докл. РАН. 1999. Т. 364 (3). С. 337—341.
253. Gregg S.J., Sing K.S. W. Adsorption, surface area and porosity. L.: Acad. Press, 1982. 430 p.
254. Voloshin V.P., Medvedev N.N., Fenelonov V.B., Parmon V.N. Simulation of the mercury porosimetry on the Voronoi network // Book of abstracts. XXth Inter. IUPAP conf. in Stat. Phys. Paris, July 20—24, 1998.
255. Dullien F.A.L. Porous Media. Fluid Transport and Pore Structure. N.Y.: Academic Press, 1979.
256. Imdakm A.O., Sahimi M. Transport of large particles in flow through porous media // Phys. Rev. A. 1987. V. 36 (11). P. 5304—5309.

257. Rege S.D., Fogler H.S. Network model for deep bed filtration of solid particles and emulsion drops // AIChE J. 1988. V. 34, (11). P. 1761—1772.
258. Lenormand R. Flow through porous media: limits of fractal patterns // Proc. R. Soc. A. 1989. V. 423. P. 159—164.
259. Bryant S., Blunt M. Prediction of relative permeability in simple pore media // Phys. Rev. 1992. V. 46 (4). P. 2004—2011.
260. Finney J. PhD dissertation, London University, 1968.
261. Thompson K.E., Fogler H.S. Modelling flow in disordered packed bed from pore-scale fluid mechanics // AIChE J. 1997. V. 43 (6). P. 1377—1389.
262. Richard P., Oger L., Lemaitre J. et al. Application of the Voronoi tessellation to study transport and segregation of grains inside 2D and 3D packings of spheres // Granular Matter. 1999. V. 1. P. 203—211.
263. Медведев Н.Н. Приложение метода Вороного—Делоне к описанию структуры межшарового пространства в полидисперсных системах // Докл. РАН. 1994. Т. 337 (6). С. 767—771.
264. Sastry S., Corti D.S., Debenedetti P.G., Stillinger F.H. Statistical geometry of particle packings. I. Algorithm for exact determination of connectivity, volume, and surface areas of void space in monodisperse and polydisperse sphere packing // Phys. Rev. E. 1997. V. 56 (5). P. 5524—5532.
265. Sastry S., Corti D.S., Debenedetti P.G., Stillinger F.H. Statistical geometry of particle packings. II. “Weak spots” in liquids // Ibid. P. 5533—5543.
266. Rebelo L.P.N., Debenedetti P.G., Sastry S. Singularity-free interpretation of the thermodynamics of supercooled water. II. Thermal and volumetric behavior // J. Chem. Phys. 1998. V. 109 (2). P. 628—633.
267. Medvedev N. N. New capabilities for geometrical analysis of the computer models of complex systems // Revue de l’Institut Francais du Petrole. 1997. V. 52 (2). P. 258—259.
268. Vandermarck S. C. Network approach to void percolation in pack of unequal spheres // Phys. Rev. Lett. 1996. V. 77 (9). P. 1785—1788.
269. Zhang Z.P., Yu A.B., Dodds J.A. Analysis of the pore characteristics of mixtures of disks // J. of Colloid and Interface Sc. 1997. V. 195 (1). P. 8—18.
270. Gordon P.A., Glandt E.D. Liquid-liquid equilibrium for fluids confined within random porous materials // J. Chem. Phys. 1996. V. 105 (10). P. 4257—4267.
271. Greenfield M.L., Theodorou D.N. Geometric analysis of diffusion pathways in glassy and melt atactic polypropylene // Macromolecules. 1993. V. 26. P. 5461—5472.
272. Rigby D., Roe R.J. Molecular dynamic simulation of polymer liquid and glass. 4. Free-volume distribution // Ibid. 1990. V. 23. P. 5312—5319.
273. Arizzi S., Mott P.H., Suter U.W. Space available to small diffusants in polymeric glasses: Alalysis of unoccupied space and its connectivity // J. Polymer Sci. B: Polymer Phys. 1992. V. 30. P. 415—426.
274. Niemela S., Leppanen L., Sundholm F. Structure effects on free volume distribution in glassy polysulfones — molecular modelling of gas permeability // Polymer. 1996. V. 37 (18). P. 4155—4165.

275. Dodd L.R., Boone T.D., Theodorou D.N. A concerted rotation algorithm for atomistic Monte Carlo simulation of polymer melts and glasses // Molecular Phys. 1993. V. 78. P. 961—996.

276. Александров А.Д. Выпуклые многогранники, М.; Л.: Гостехиздат, 1950.

277. Емеличев В.А., Ковалев М.М., Кравцов М.К. Многогранники, графы, оптимизация. М.: Наука, 1981.