



metals



文章

LaSCA：复杂系统微观结构可视化分析工具

田泽安、张忠阳、小江、冯伟、沈平、吴凡



<https://doi.org/10.3390/met13020415>

文章

LaSCA: 复杂系统微观结构可视化分析工具

田泽安 *, 张忠阳, 小江, 冯伟, 沈平, 吴凡



湖南大学计算机科学与电子工程学院, 湖南长沙 410082 tianzean@hnu.edu.cn

摘要: 在过去的几十年里, 人们开发了大量的无序/复杂系统结构分析的可视化软件, 但这类系统结构量化的唯一性和正确性仍然是一个挑战。本文介绍了一种基于最大标准聚类分析 (LaSCA) 的可视化分析工具, 该工具满足一般结构分析的三个基本要求: 物理正确性、客观识别性和单射表示性。LaSCA 的具体功能包括复杂系统的有向图模型、新颖的结构参数、拓扑紧密堆积结构、任意部分对分布函数、长程有序结构的识别、图形元素的自适应选择、原子 ID 的跟踪显示、用户自定义视角、原子选择的各种选项等。该程序有效地基于 OpenGL 硬件加速, 采用特殊算法将键视为圆柱体或直线, 并将原子视为球体、二十面体、四面体或点。LaSCA 可以在 50 秒内处理超过 120 万个原子, 在一台拥有 1 GB 内存和四核 (Intel Core i7-9700) 的 PC 上。它是强大的和低成本的操作短, 中, 长距离有序结构和跟踪它们的演变。

关键词: 复杂系统; 可视化分析; LaSCA; 长程有序结构



引文: Tian, Z.; 张志江泽民说, X.; 魏, F.; Ping, S.; Wu, F. LaSCA: A 可视化分析工具 复杂系统的微观结构 《金属》2023 年, 第 13 页, 第 415 页。https://doi.org/10.3390/met13020415

学术编辑: Varvara Romanova 和 Alain Pasturel

收稿日期: 2023 年 1 月 6 日
修订日期: 2023 年 2 月 6 日
接受日期: 2023 年 2 月 14 日
发布时间: 2023 年 2 月 17 日



版权所有: © 2023 由作者。
瑞士巴塞尔 MDPI 许可证持有人。

这篇文章是一个开放获取的文章
根据以下条款分发:
知识共享的条件

署名 (CC BY) 许可证 (https://creativecommons.org/licenses/by/4.0/).

1. 计算机模拟作为基于实验归纳和模型推导的第三范式, 近几十年来被广泛用于量化材料的结构和性能 [1–3]。模拟和实验的输出通常是具有空间、时间或时空特征的数值, 例如系统中所有原子的坐标、速度和能量 [4]。有效的结构定量是研究结构–性质关系的前提。

过去已经开发了许多用于局部结构识别的算法, 根据原子的邻域是否依赖于预设的截止距离 R 而分为两类。合适的 R 对于 R 依赖的方法至关重要, 例如基本聚类分析 [5], 共同邻居分析 (CNA) [6], Honeycutt-安德森对 (HA 对) [7, 8] 和协调多面体方法 [9]。Voronoi 曲面细分 (VT) 是一种 R 独立的方法, 它将 2D/3D 空间划分为凸多边形/多面体 (围绕每个点), 没有重叠或间隙, 并指出共享边缘 (2D) 或小平面 (3D) 彼此相邻 [10, 11]。

CNA 在识别局部结构方面是有效的, 例如 13 个原子的 FCC/HCP 单元, 15 个原子的 BCC 单元和 13 个原子的二十面体; 然而, 对 R 的依赖性导致局部结构量化的不确定性和主观性 [12], 偏离了唯一客观性的基本科学原则。基于对称划分, 运行 VT 不需要预设参数; 然而, 对于无序系统, VT 可能导致 Voronoi 邻居异常 (VNA), 其中一些较近的邻居丢失 [13]。当感兴趣的对象 (例如, 原子间力和势能)

对距离很敏感。换句话说, 当使用 VT 对无序系统进行结构分析时, 物理正确性可能难以保证。

即使已经确定了每个原子的局部结构特征, 仍然很难量化复杂系统中的各种中程和长程结构, 例如多晶系统中相的空间分布[14]和拓扑紧密堆积 (TCP) 晶体的重复单元[15-17]。可视化是解决这一问题的直接而有效的手段。例如, Diamond 是为晶体[18]设计的, 但不适用于非晶体系统; ChemDraw [19]支持各种键类型和格式, 但计算机科学和专业化学知识是其有效使用的先决条件; OVITO [20]是一个跨平台类型的软件, 支持键角分析, CNA 和 VT。然而, 这些类型的软件要么依赖于 R, 要么有 VNA 问题。因此, 迫切需要开发用于量化局部结构的软件, 其中保证独特的客观性和物理正确性。

在本文中, 最大标准聚类分析 (LaSCA) 的可视化工具, 这是基于欧氏距离 (以避免 VNA) 和 R-独立 (唯一的客观性保证)。第二节首先总结了一般结构分析的基本要求, 然后阐明了满足一般结构分析所有基本要求的 LaSCA 的基本逻辑。第 3 节介绍了 LaSCA 的几个具体功能。最后, 通过一个案例研究, 说明了 LaSCA 在识别长程有序结构、可视化分析和部分对分布函数 (PDF) 方面的优势。

2. 核心概念

2.1. 一般结构分析的基本要求局域结构是由中心原子和与中心相距一定距离 R 的相邻原子组成的。基于这个定义, 原子系统的一般结构分析应该满足以下三个基本要求。

Req. 1、身体的正确性。在一个原子周围, 半径为 R 的球形区域内的所有原子都应该是它的邻居。换句话说, 将不会有类似 VT 的 VNA 的情况。

Req. 2、客观识别。局部结构的识别与任何预设参数无关。VT 满足这一要求, 而 CNA、HA 对和 i -CNA [9]不满足。

Req. 3: 内射表示。从局部结构到表征, 符号都是单射的。如果某些结构不能被有效地标记 (例如, HA-对和 CNA) 或不同的结构具有相同的标记 (例如, VT)。

2.2. 最大标准聚类分析 (largest standard cluster analysis, LaSCA) 满足了上述所有要求。在 LaSCA 中, 如果两个原子在一定距离 r 之内离开, 则它们被认为是彼此的邻居。换句话说, 原子之间的邻域基于欧拉距离, 确保 Req. 1。

如果一对原子是邻居, 则使用键将它们连接起来;然后, 可以构建由一个原子及其所有邻居组成的局部结构, 如图 1a 所示, 其中每个邻居可以包括具有中心的参考对 (或根对, RP)。由 RP 的两个原子共享的原子被称为该 RP 的公共近邻 (CNN)。RP 及其所有 CNN 被称为公共邻居子集群

(CNS), 如图 1b, d 所示。CNS 的结构特征由 CNN 之间的连接来表示 (参见图 1c, e), 可以通过 CNS 索引 (S_{ijk}) 来描述, 其中 “S” 是前缀 (它来自 “子簇”), i 代表 CNN 的总数, j 是 CNN 之间的键的总数, k 是部分或全部由 CNN 组成的最长链的长度。因此, 图 1b 中所示的 CNS 是 S555, 图 1d 中所示的 CNS 是 S422。

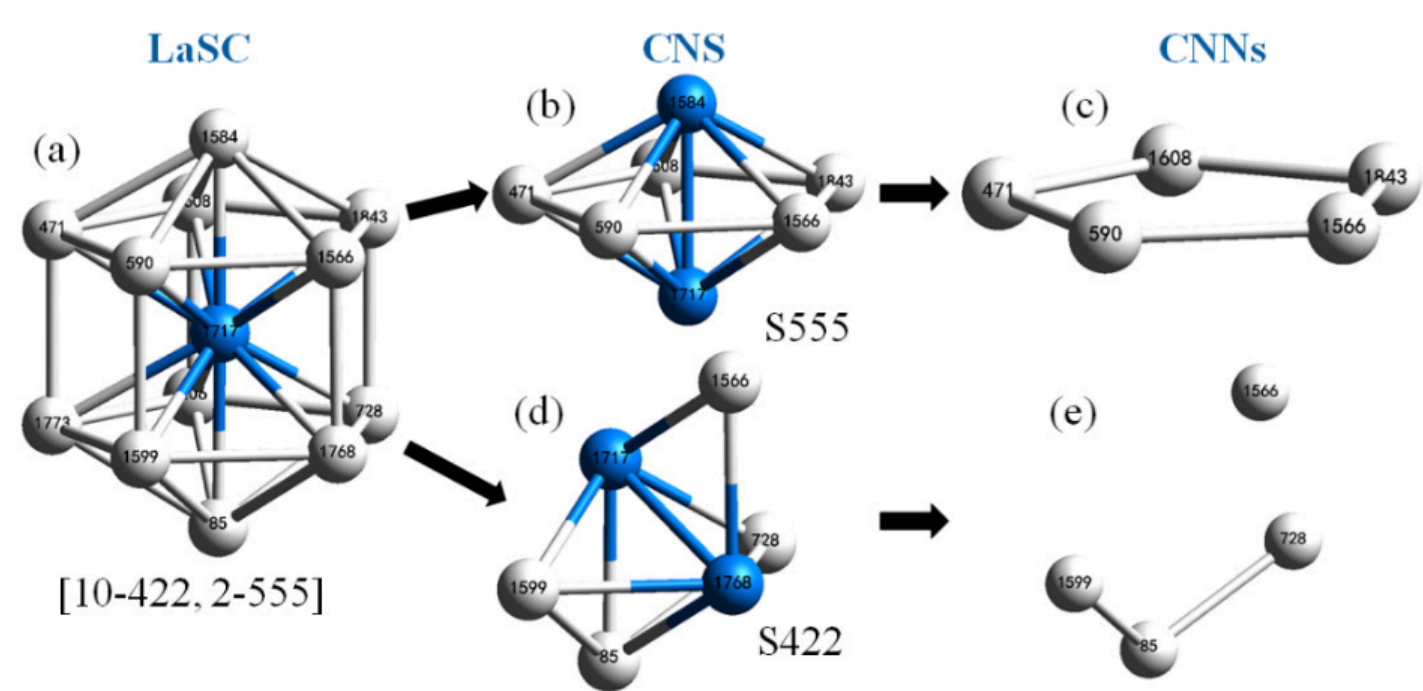


图 1.最大标准集群 (LaSC) 的逻辑分解。(a)截短的十面体 (10-422, 2-555) ; (B) CNS S555; (c) S555 的拓扑结构; (d) CNS S422;和 (e) S422 的拓扑结构。
r 的值越大, 原子周围的邻居数量越多, CNN 和 CNS 之间的连接将更加复杂;当 r 大于某个临界值时, 多键点 (MBP, 至少有三个键在一起) 和公共邻居子环 (CNSR, 部分 (不完全) 由 CNN 组成) 将是不可避免的。如果集群既不包括 MBP 也不包括 CNSR, 则将其定义为标准集群 (SC) 。在每个原子周围, 最大的 SC (LaSC) 可以通过算法唯一识别[12];同时, LaSC 的 r 值被分配给 R。LaSC 的这种识别不仅确保了 Req. 2 满足, 而且可以导出一系列基于 R 的参数。
一个 LaSC 可以用一组 n-Sijk 格式的二元元组来系统地表示, 其中 nis 是 LaSC 中 CNS Sijk 类型的数量;因此 CN= CN n。例如, 在图 1a 所示的局部结构中, 可以构造 2 个 S555 和 10 个 S422;因此, 将其表示为 (2-555, 10-422) 。很容易证明 CNS 到 CNS 指数是任何 LaSC 中的内射映射;然后, Req.三是满意。

3. 虽然 LaSCA 中的 CNS 指标似乎类似于 CNA 和 HA 对中的成对结构的符号, 但只有通过 LaSCA 才能获得 $CNS \longleftrightarrow S_{ijk}$ 的内射映射。这一优势使许多严格的结构分析;例如, 复杂晶体相的空间分布的系统研究[17]和均匀球体的堆积的临界状态[21]及其局部旋转对称性[22, 23]。
 Σ

在 LaSCA 中, 可以导出一组基于 R 的参数。R 的值随原子的局部环境而变化;因此, Rare 的平均值、中值、均方根等也是重要的结构参数。例如, 固化期间 R 平均值的温度依赖性对于识别液-液转变和液-固转变开始的临界点很有用[24, 25]。

LaSCA 的另一个重要特征是两个原子之间的邻域可能是不对称的。如图 2 所示, 假设 $R > d > R$, 其中 dis 是原子 A 和 B 之间的距离, 兰德 Rare 分别是原子 A 和 B 的截止距离 R;那么, 原子 B 是原子 A 的邻居之一, 但反之亦然。原子对之间的这种邻域不对称性反映了原子局部堆积密度的差异, 提供了更多关于系统的结构信息。此外, 可以建立系统的有向图, 而不是无向图。

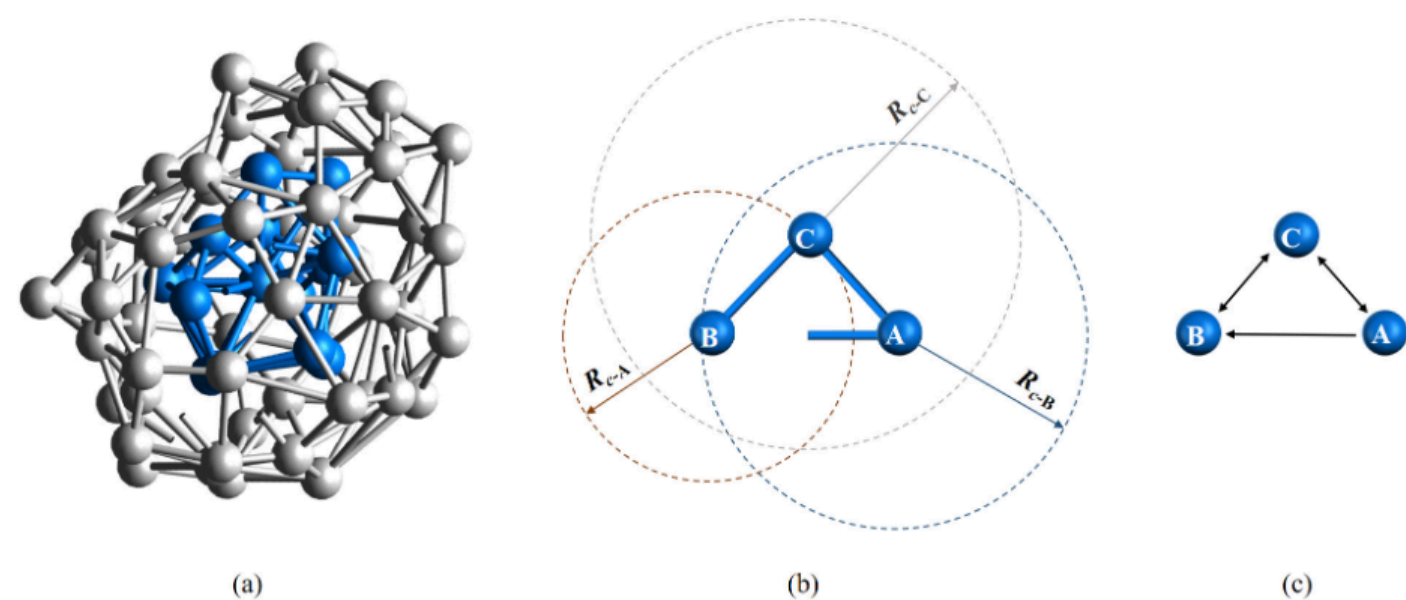


图 2.原子间连接的有向图表示。(a)BCC LaSC 内的键合关系和 BCC LaSC 的相邻原子之间的键合关系;这里, 未示出层与层的键合。(b)原子之间的双向和单向边。(c) (B) 中键合关系的图解。

基于 LaSC 的可视化分析

在没有任何预设参数的情况下, LaSCA 可以识别有序和无序系统中每个原子周围的所有局部结构。例如, 简单 FCC、HCP 和 BCC 晶体的结构单元分别为 (12-421)、(6-421, 6-422) 和 (6-444, 8-666)。在确定了每个原子周围的 LaSC 之后, 还可以计算出更多的结构参数, 如配位数 (CN), 角分布函数和 BOO 参数。微观结构表征的完整性使我们能够在不同层次上定义系统的结构熵[26]。此外, 一组基于 R_c 和键长的结构指数 (如系统的平均值, 标准差和均方根) 及其在热力学过程中的温度/时间依赖性在识别相变, 临界点等方面非常有用[25]。这些结构索引无法使用其他方法提供。

对于复杂体系, 如结晶过程中的固液共存状态或多晶共存体系, 各种原子的空间分布特性极为重要。然而, 这是非常困难的, 用数值方法来描述这些特性, 因此, 可视化是特别重要的, 在这个时候。

针对结构分析 (而不仅仅是显示功能), 开发了一个基于 LaSC 的程序, 这里也称为 LaSCA。除了识别每个原子周围的局部结构 (短程有序) 外, LaSCA 的三个主要功能是原子选择, 颜色设置和尺寸配置。原子选择可以基于 LaSCA 的输入特征 (例如 3D 配位、势能、动能、电荷、原子类型和原子 ID) 和/或输出特征, 包括 CN、CNS 或 LaSC 类型, 以及 LaSC 集合 (例如具有 S555 的原子)。原子的颜色和大小可以根据这些特征自由设置。支持任意截面分析, 可以通过三种方式设置截面: 使用米勒指数加上原子的位置、两个指定原子的中平面或三个指定原子的位置。此外, 还设计了许多用户友好的功能和高级结构分析功能, 其中一些功能如下。

- 原子表示根据要显示的原子数量自动切换, 从球体到二十面体和四面体再到点。这是为了尽可能快地呈现渲染图像。
- 原子的 ID 可以被可视化地显示和跟踪。不仅身份证号码在旋转和变换时始终面向用户, 而且其大小和颜色也可以由用户以各种方式配置。
- 有多种方法可以帮助用户获得合适的视角。用户可以自定义 (固定) 旋转轴 (OX、OY、OZ 和任何轴); 当显示截面时, 提供 “垂直观察” 快捷方式。

σ

- 可以系统地量化一组拓扑紧密堆积 (TCP) 结构 (包括 Frank-Kasper 多面体) [27], 基于此可以识别 TCP 结晶区域 (如 A15, C15 和σ相) [16, 17, 28, 29]。
- 长程有序结构可以用拓扑判据来识别。目前, 有几种复杂的晶体组成的六方密堆积 (HCP) 层, 如双 HCP 和菱形晶体。
- 逻辑 OR 可以通过在属性被离散化为多个区间 (项) 后选择多个项来实现, 逻辑 AND 通过流水线操作实现, 也支持逻辑 NOT。
- 通过三进制模式实现任意部分 PDF。使用此功能, 用户可以获得任何类型原子对的部分 PDF, 包括多组分合金中的元素对和复杂系统中基于结构的对 (FCC, HCP 和 BCC 原子) [25, 30]。

4. 为例

4. 1. 长程有序结构用数值计算很难识别长程有序结构 (由至少两种满足一定空间分布特征的 LaSC 组成)。最近, 华为做了一些有益的尝试。如图 3a 所示, 在双六方密堆积 (DHCP) 晶体中, 重复单元由四个 HCP 层组成, 其中每个原子具有六个以等边三角形排列的邻居, 其中 ACAB... 顺序图 3b 显示了初始化为 HCP 单晶[31]的冲击块体钼的一部分内 FCC 和 HCP 原子的分布, 其中原子由灰色点表示。当采用二十面体来表示由 LaSC 类型进行颜色编码的原子时, 我们得到图 3c。随后, 进行 DHCP 长程有序结构分析, 并在图 3d 中绘制 DHCP 原子, 其中长程周期性是明显的。目前, 密堆积的菱面体 (Sm 型) 晶体结构也可以被识别; 它的重复单元由 ABCBCACAB 的九个 HCP 层的序列组成。

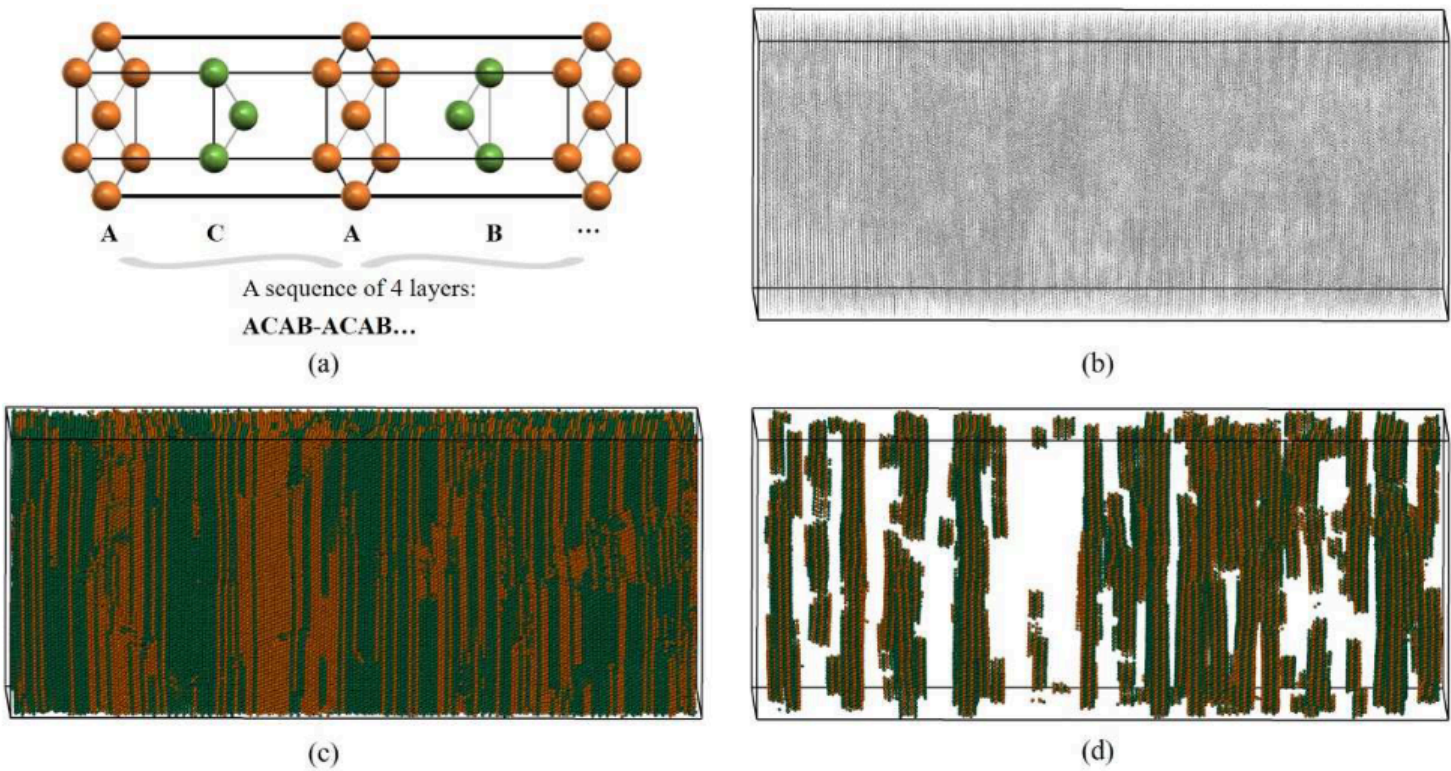


图 3. LaSCA 的 DHCP 远程结构分析示意图。(a)DHCP 晶体的结构特征。(b)灰点表示 FCC 和 HCP 原子。(c)用二十面体表示的类色 FCC 和 HCP 原子。(d)此系统中的 DHCP 原子。

4. 2. 复杂晶体的可视化分析基于 LaSC, 我们定义了一组局部结构, 拓扑密排 (TCP) LaSC, 其特征在于 (n-S444, n-S555, n-S666), 其中 $n > 0$ [27]。根据欧拉定理, 很容易证明 $2 \times n + n = 12$; 因此, TCP LaSC 可以用更紧凑的格式 “Ln” 表示, 其中 “L” 表示 n 的个数, 范围为

0 - 5, 分别为 Z、A、B、C、D 和 E, “n” 是中心原子的配位数 ($n = n_1 + n_2 + n_3$)。例如, (1-444, 10-555, 2-666) 是 A13。

简单的 FCC、HCP 和 BCC 晶体仅由一种类型的原子组成, 分别为 FCC (12-421)、HCP (6-421, 6-422) 和 BCC (6-444, 8-666) 原子。然而, 大多数复杂晶体包含几种类型的 LaSC [28]; 此外, 晶体类型不仅取决于不同类型 LaSC 的数量比例, 还取决于它们的空间分布。在这种情况下, 视觉分析非常有用。在这里, 选择通过 MD 模拟快速冷却纳米液滴获得的 1200 个原子的 FeCuNi 纳米颗粒来阐明视觉分析过程, 关键步骤如图 4 所示。

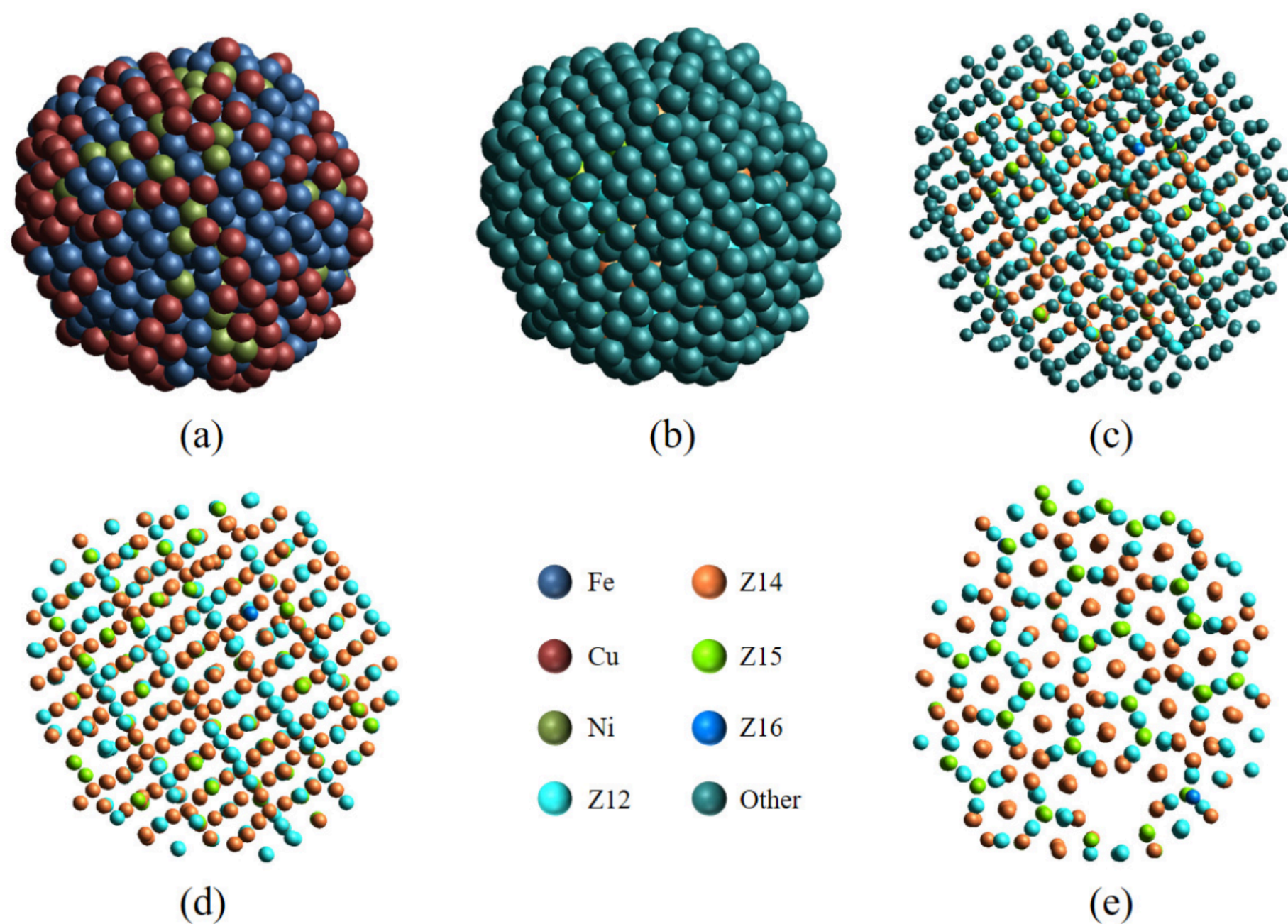


图 4. FeCuNi 纳米颗粒的结构分析。3D 视图按元素类型 (a) 或 LaSC 类型 (b-e) 进行颜色编码。(B, e) 中原子的半径是 (c, d) 中原子半径的两倍。(d, e) 仅保留四个 TCP (Z12、Z14、Z15 和 Z16) 原子。

如图 4a 所示, 它看起来像一个无定形颗粒。在识别出每个原子周围的 LaSC 之后, 原子被着色为 LaSC 类型 (参见图 4 b), 其中, 除了四个 TCP 原子 (Z12、Z14、Z15 和 Z16) 之外, 其他原子统一为深绿色。当原子半径减小 60% 时, 它们的分布具有明显的空间周期性 (图 4c)。然后, 图 4d 中只保留了四个 TCP 原子; 原子分布的周期性变得更加清晰, 复杂的空间特征明显。从不同的角度观察, 图 4 e 提供了与图 4d 不同的另一个空间投影 (具有缺陷)。这些不同的投影揭示了这种纳米颗粒的结构复杂性, 通过计算 Z12、Z14 和 Z15 原子的数量比, 将其鉴定为 σ 相晶体 [28, 29]。借助 LaSCA 提供的视觉分析, 并牢记晶体学专业知识, 还可以识别其他更复杂晶体的结构单元 [17]。

4. 3. 多组元合金的偏 PDF 分析以 5000 个原子的 NiAg 纳米颗粒为例说明 LaSCA 导出的偏 PDF (pPDF) 曲线的功能。在所有的 LaSC 被识别之后, 所有的原子根据 LaSC 类型被分组 (见图 5a), 其中 tDH (截顶十面体)、FCC 和 HCP 原子被认为是 A 组 (1016 个原子), Z12 和 Z16 原子作为基团 B (1621 个原子), 所有其他原子作为 C 族 (2363 个原子, 图 5a 中未显示), 更多细节请参见补充视频 S1: 构建图 5a 的视频。然后, 导出三元体系的六个 pPDF 曲线, 其中, 为了阐明每种类型对总 PDF 的贡献, 进行求和归一化[32],

也就是说, $\sum g(r) = g(r) \cdot \sum g(n) = g(n)$

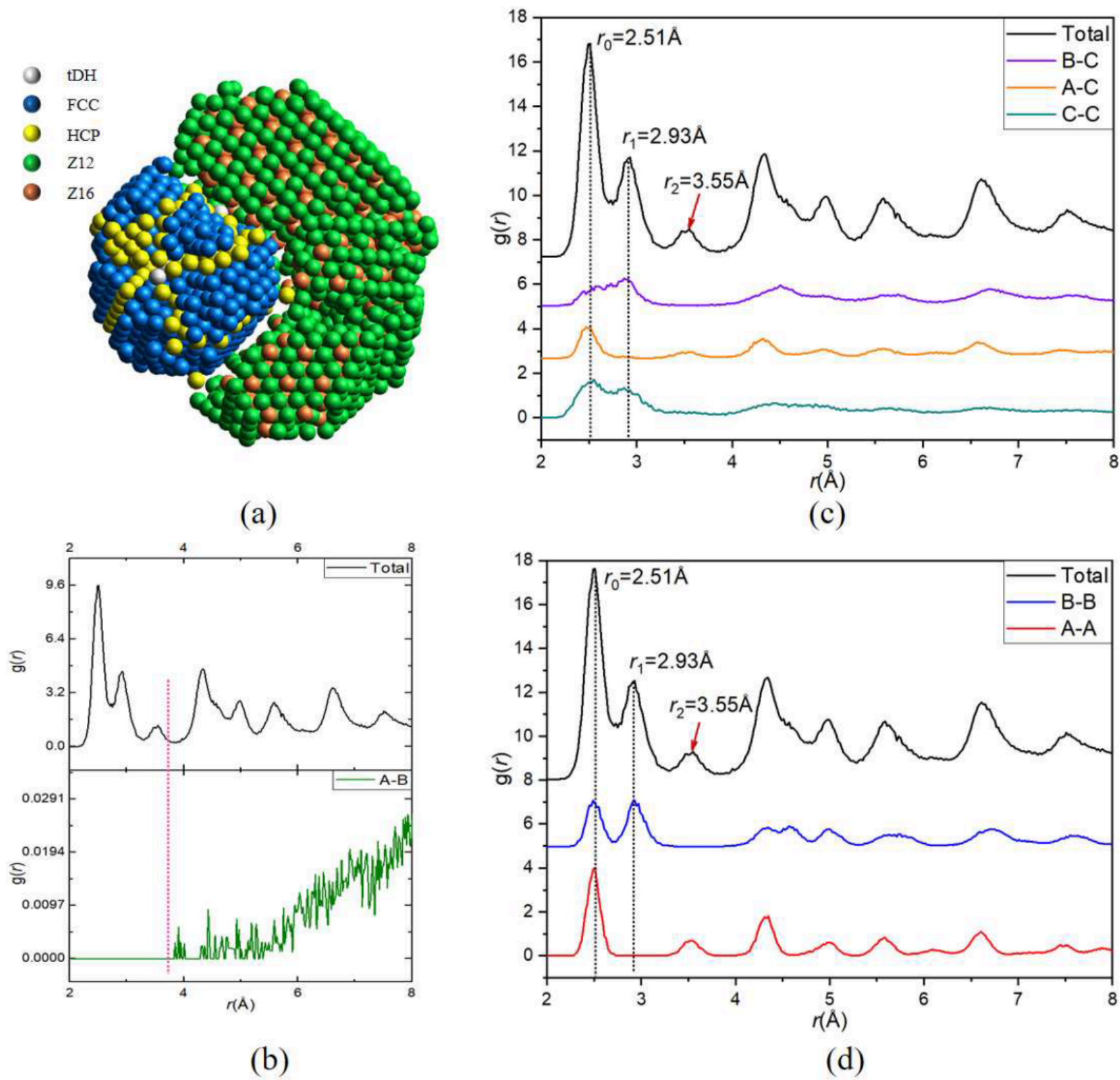


图 5.基于具有 NiAg 纳米颗粒的三元模式的部分 PDF 曲线的图示。(a)FCC、HCP、tDH、Z12 和 Z16 原子的 3D 视图, 按 LaSC 类型进行颜色编码。(b-d)总 PDF 曲线与六条部分 PDF 曲线之间的对应关系, 按曲线的幅度分组。

在 6 条 pPDF 曲线中, 只有 $g(r)$ (图 5 B) 对总 PDF 的前三个峰没有贡献 (见图 5a), 这与 A 组中的原子远离 B 组中的原子的事实一致。事实上, A 原子构成五重对称 FCC 结晶区, 而 B 原子构成 TCP 复合结晶区, 并且在两个结晶区之间存在宽位错 (由 C 原子构成)。

零是总 PDF 上第二个峰位置处的 $g(r)$ (图 5c) 和 $g(r)$ (图 5d) 的高度;因此, A 原子 (属于五重对称 FCC 结晶区) 对总 PDF 上的第二个峰没有贡献, 因为 $g(r)$ 在该位置处也为零 (图 5a)。换言之, 在 $r = 1.167 r$ ($r = 2.51 r$ 是第一峰的位置) 处的峰是由 TCP 结构和其它结构 (由 C 原子表示) 引起的。相比之下, 在总 PDF 中, 只有 $g(r)$ 对 $r = 1.414$ 处的第三个峰有贡献 (图 5d)。C 原子具有 TCP 特性, 因为 $g(r)$ 和 $g(r)$ 对总 PDF 的第一和第二峰都有贡献, 但对第三峰没有贡献, 而 $g(r)$ 仅对第一峰有贡献 (对第三峰也有轻微贡献)。因此, 结合可视化分析, pPDF 曲线可以帮助更好地理解复杂结构。

5. 与 MFC 的讨论本工具自 2005 年 8 月起由田泽安使用 C++ 开发; LaSCA 的二进制可执行文件现在大小小于 600 M, 目前仅适用于 Windows 操作系统 (WIN 7/10), 在不加载数据时内存小于 30 M。它是一个并行版本, 使用 OpenMP 库, 在 CPU 级别上构建所有原子周围的 LaSC 的并行识别, 并使用 OpenGL 库, 渲染由 GPU 加速的原子 (如果可用)。

物理正确性、客观识别和单射表示使得 LaSCA 对于复杂系统特别有用, 其中系统的 PDF 曲线上的第一谷的高度大于零和/或主要局部结构包括最近邻居之外的原子 (例如 BCC 晶体)。如图 5a 所示, Z12 和 Z16 原子的 R_c 值约为 3.6 \AA , 而对于 HCP 和 FCC 原子, R_c 小于 2.6 \AA 就足够了。换句话说, 3.6 \AA 和 2.6 \AA 都无法用于识别该纳米颗粒中所有类型的 LaSC。然而, 对于 LaSCA, 由于其无参数的基本属性, 这种困难并不存在。

TCP 结构由 12-15 个原子组成, 在纳米颗粒、超级合金、高熵合金和高压条件下的合金中普遍存在。然而, 由于它们的拓扑性质, 很难给出严格的几何定义, 因此, 模拟样本的数值识别是困难的。对于具有固有拓扑标准的 LaSCA, 这个问题可以直接解决, 而无需任何额外的努力, 如图 4 和 5a 所示。

尽管已经识别出了由复杂晶体组成的局部结构, 但是识别这种长程有序区域仍然非常困难并且计算成本很高, 因为通过模拟几乎不可能获得完美的复杂晶体。LaSCA 保留了局部结构的几何特征, 为基于其拓扑特征识别此类晶体开辟了一条可用的路径, 例如识别复杂系统中的 DHCP 原子。

重要的是, 阐明一般结构分析的三个基本要求将指导结构分析方法的发展; 基于 LASC 的结构指标, 如系统在各个层次上的结构熵和基于 RC 的参数, 是对材料科学的关键贡献, 特别是在理论研究领域。

未来将引入 AI 技术, 用于识别由数十至数百个原子组成的复杂结构, 例如 C15 相, 具有 24 个原子单元, β -Ta, 具有 30 个原子单元。作为一个通用工具, 它还将提供某些附加功能, 例如绘制电荷密度和 ELF。

补充材料: 以下支持信息可从以下网址下载: <https://www.mdpi.com/article/10.3390/met13020415/s1>, 视频 S1: 构建图 5a 的视频。

作者贡献：概念化，Z.T.;方法论，Z.T.;软件 Z.T. Z.Z., X.J.和 F.W. (Feng Wei) ; validation, F.W. (Fan 形式分析, Z.T.;调查局 Z. Z F.W. (Feng Wei) 和 SP;资源, F.W. (Fan Wu) ; data curation, Z.T.和 X. J.;写作--初稿准备, Z.Z.;写作-审查和编辑, Z.T., Z.Z., S.P.和 X.J.;可视化, Z.T.;监督, Z.T.和 F.W. (Fan 吴先生) ;项目管理, Z.T.和 Z.Z. 中的至少一个;融资收购, Z.T.所有作者均已阅读并同意手稿的出版版本。

资金来源：本研究得到[国家重点研发计划]基金号[2021 YFB 0300102]、[国家自然科学基金]基金号[U1612442]和[51661005]、[湖南省自然科学基金]基金号[2022 JJ 30166]、[湖南省 A 类基金]基金号[2022020119853]的资助。

数据可用性声明：通过电子邮件联系 tianzean@hnu.edu.cn 以获取 LaSCA 的二进制可执行文件。用户手册，其中提供了详细的信息 LaSCA，也可以通过上述电子邮件地址获得。

致谢：作者感谢国家重点研发计划（批准号：2021YFB0300102）、国家自然科学基金（批准号：2021YFB0300102）、国家自然科学基金（批准号：U1612442 和 51661005）和湖南省自然科学基金（批准号：2022JJ30166）。研究还得到了 GHfund A (2022020119853) 的支持。

利益冲突：作者声明无利益冲突。资助者在研究设计、数据收集、分析或解释、手稿撰写或结果发表决策中没有任何作用。

引用

1. Juhás, P.; Cherba, D.M.; Duxbury, P.M.; Punch, W.F.; Billinge, S.J.L. 固态纳米结构的从头算测定。Nature 2006, 440, 655–658. [交叉参考] [PubMed]
2. Streitz, F.H.; Glosli, J.N.; Patel, M. V., 《凝固模拟中的尺寸缩放》。物理修订信函 2006, 96, 225701. [交叉参考] [PubMed]
3. Cliffe, M.J.; Dove, M.T.; Drabold, D.A.; Goodwin, A.L., 从衍射数据确定无序材料的结构。物理修订信函 2010, 104, 125501. [交叉参考] [PubMed]
4. Faken, D.; 约翰松<英>来华传教士。结合 3D 计算机图形的局部原子结构的系统分析。Comput. Mater. Sci. 1994, 2, 279–286. [交叉引用]
5. Qi, D.W.; Wang, S.金属液体和玻璃中的二十面体有序和缺陷。Phys. Rev. B 1991, 44, 884–887. [交叉引用]
6. Honeycutt, J. D.; 安达信港小 Lennard–Jones 团簇熔化和冻结的分子动力学研究。J. Phys. Chem. 1987, 91, 4950–4963. [交叉引用]
7. 阿斯特, T. 围绕无序紧密堆积的变化。J.物理.康登斯 Matter 2005, 17, S2361–S2390. [交叉引用]
8. Jonsson, H.; 安达信港 Lennard–Jones 液体和玻璃中的二十面体有序。物理修订信函 1988 年, 第 60 页, 第 4 页。[交叉引用]
9. Polak, W.Z.模拟单原子团簇内部结构识别的效率：共邻体分析法与配位多面体法的比较。Comput. Mater. Sci. 2022, 201, 110882. [交叉引用]
10. Tuceryan, M.; Jain, A.K.基于 Voronoi 多边形的纹理分割 IEEE 传输模式分析马赫内特尔 1990, 12, 211–216. [交叉引用]
11. Jones, T.R.; Carpenter, A.; Golland, P. Voronoi 基于图像流形上细胞的分割。生物医学图像应用的计算机视觉; Liu, Y., 江, T., 张, C., 编辑; 计算机科学讲义; 施普林格: 柏林, 海德堡, 2005 年; 第 3765 卷, 页。535–543, ISBN 978–3–540–29411–5。
12. Tian, Z.A.; 刘, R.S.; Dong, K.J.; 余先生, A.B.分析无序系统局域结构的一种新方法。EPL 2011, 96, 36001. [交叉引用]
13. 王世玉; Tian, Z.A.; Dong, K.J.; 谢峰基于 Voronoi 曲面细分和欧氏距离的邻域不一致性。J.合金.化合物 2021, 854, 156983. [交叉引用]
14. 李洪志; Karina, A.; Ladd–Parada, M.; Späh, A.; Perakis, F.; Benmore, C.; Amann–Winkel, K.无定形固体水的长程结构。物理化学杂志 B 2021, 125, 13320–13328. [交叉引用]
15. 周立伦压力对急冷 MgZn 合金组织和性能的影响。杰·板牙。Sci. 2021, 56, 4420–4432. [交叉引用]
16. Mo, Y.F.锆的液相和 A15 晶体中的短程有序。J. Non-Crystalline Solids 2019, 513, 111–119. [交叉引用]
17. Jiang, M.X.; Tian, Z.A.; 谢, Q.; Gao, T.H.; Liang, Y.C.; 陈角, 澳-地快速凝固 NiAg 纳米颗粒中 C15 单元的数值识别。《物理学报》2022, 71, 176402. [交叉引用]
18. 彭宁顿可视化晶体结构信息系统。应用晶体学杂志 1999, 32, 1028–1029. [交叉引用]
19. 门德尔松公司 ChemDraw 8 Ultra, Windows 和 Macintosh 版本。J.化学信息计算机 Sci. 2004, 44, 2225–2226. [交叉引用]

20. 斯托科夫斯基, A. 利用开放式可视化工具 OVITO 实现原子模拟数据的可视化与分析。模型 Simul Mater. Sci. Eng. 2010, 18, 015012. [交叉引用]
21. Tian, Z.A.; Dong, K.J.;余先生, A.B.均匀球体堆积中的结构演化。Phys. Rev. E 2014, 89, 032202. [交叉引用]
22. Tian, Z.A.; Dong, K.J.;余先生, A.B.急冷银熔体晶化过程中的结构演化。2015, 354, 499-510. [交叉引用]
23. Radziuk, D.;默瓦尔德, H. 超声波处理的液体界面, 用于清洁和分离过程的进步。物理化学物理 2016, 18, 21-46. [交叉参考] [PubMed]
24. Luo, Y.C.; Tian, Z.A.;郑, Q.;胡, L.; Dong, K. J.亚临界冷却速率下 FeNiCo 合金熔体模拟凝固研究揭示的结晶见解。J. Non-Cryst. Solids 2022, 586, 121557. [交叉引用]
25. 胡湖, 加-地 TCP 结构在 NiAg 合金玻璃形成中的作用。J.合金。化合物 2022, 897, 162743. [交叉引用]
26. 李, J. J.; Tian, Z. A.;谢, Q.; Xiong, S. X. 成分对急冷 FeCuNi 合金显微组织的影响。化学物理快报 2020, 753, 137630. [交叉引用]
27. 弗兰克足球俱乐部卡斯珀, J.S.复杂的合金结构被认为是球形填料。二.代表性构造的分析与分类。Acta Cryst.1959, 12, 483-499. [交叉引用]
28. Wu, Z.Z.; Mo, Y.F.;朗湖; Yu, A.B.;谢, Q.;刘, R.S.; Tian, Z.A.非晶钼的拓扑密排特性。物理化学物理 2018, 20, 28088-28104. [交叉引用]
29. 李, X.; Tian, Z. A.;谢, Q.; Dong, K. J. 拓扑紧密堆积的 Fe 70 Cu 15 Ni 15 纳米颗粒-模拟研究。真空 2021, 193, 110523. [交叉引用]
30. 李, J. J.; Tian, Z.A. FeCuNi 金属玻璃第二峰分裂的结构成因。的低温 Phys. Lett. 2020, 42, 81-89. [交叉引用]
31. 刘, B.B.;陈永庆;郭, L.;李, X.F.;王, K.; Deng, H.Q.; Tian, Z.A.; Hu, W.Y.; Xiao, S.F.; Yuan, D.W.冲击诱导钇在多层六方密堆积结构间相变的原子模拟。国际机械科学杂志 2023 年, 提交。
32. 朗湖; Deng, H.Q.; Tian, Z.A.;高, F.; Hu, W.Y.; Wen, D. D.; Mo, Y.F. Mo 对 Ni-Zr 合金结构和非晶形成能力的影响。J.合金。化合物 2019, 775, 1184-1198. [交叉引用]

[CrossRef]免责声明/出版商备注: 所有出版物中包含的声明、观点和数据仅为个人作者和投稿人的声明、观点和数据, 而非 MDPI 和/或编辑的声明、观点和数据。MDPI 和/或编辑不对因内容中提及的任何想法、方法、说明或产品而造成的任何人身或财产伤害承担责任。