



Kandidatavhandling
Fysik

SIMULERING AV DEFLEKTFORMATION I VOLFRAM

Otto Lindblom

6.2.2018

Handledare: Tommy Ahlgren

Granskare: Tommy Ahlgren

HELSINGFORS UNIVERSITET
INSTITUTIONEN FÖR FYSIK

PL 64 (Gustaf Hällströms gata 2)
00014 Helsingfors universitet

Sammanfattning

I denna avhandling studeras effekterna av högenergetisk neutronstrålning på volfram, med molekylodynamiska simulationer som det huvudsakliga verktyget. Simulationerna utfördes i form av enskilda kollisionskaskader med rekylenenergier i intervallet 1-50 keV. Detta motsvarar realistiska rekylenenergier i volfram som bestrålas av 14.1 MeV neutroner som produceras vid sammanslagning av deuterium och tritium i en fusionsreaktor. Efter varje lyckad kollisionskaskad analyserades punktdefekterna som bildades innan en nästa kaskad startades från en identisk simulationscell ur en annan, slumpmässig rekylvinkel. Utgående från resultaten ur flera upprepade kaskader kunde man erhålla kvantitativa resultat över hur totala antalet punktdefekter i cellen samt defekternas fördelning i medeltal varierar med rekylenenergin. Resultaten visade att totalantalet punktdefekter ökade så gott som direkt proportionellt mot rekylenenergin. Då energin ökar, växer också både antalet defektkluster och själva klusterstorleken. Ytterligare kunde man observera att defekterna vid högre energier spred ut sig över en större volym kring den primära kollisionsatomen än vad som skedde vid låga energier. Resultaten från denna studie är giltiga på tidsskalor av storleksordningen 10 ps, men torde gå att tillämpa i vidare forskning med t.ex. kinetiska Monte Carlo-simulationer för att åstadkomma modeller som gäller över makroskopiska tidsperioder.

INNEHÅLL

1	Inledning	2
2	Teori	3
2.1	Volfram	3
2.2	Strålningsskador i materia	3
3	Metoder	5
3.1	Molekyldynamik	5
3.2	Interatomära potentialer	6
3.3	Kaskadsimulationerna	7
3.4	Analys av data	8
4	Resultat	9
5	Slutsatser	11
	Referenser	12

1 INLEDNING

Det allt ökande energibehovet i vårt moderna samhälle har skapat ett tydligt behov av nya energikällor. En av de mest eftertraktade av dessa är fusionskraften; ett fusionskraftverk kan producera energi i samma skala som ett modernt fissionskraftverk, men utan det radioaktiva avfallet och risken för en förödande härds smälta [1].

Ett omfattande problem i utvecklandet av fusionskraft är dock de extrema omständigheterna som råder inne i reaktorn och effekterna som detta har på materialen som används. Plasman i reaktorn når temperaturer på upp till 150 miljoner Kelvin, vilket innebär att reaktorkomponenterna belastas av mycket höga värmeflöden [2]. Deuterium-tritium reaktionen, där en deuterium- (^2H) och en tritiumatom (^3H) fusioneras till en atom helium-4, ger också upphov till en snabb, upp till 14,1 MeV neutron. [3, 4] Den icke-laddade neutronen växelverkar mycket svagt med elektroner och kan därför lätt tränga djupt in i reaktorväggarna. Om en högenergetisk neutron råkar kollidera med en atomkärna i väggmaterialet, uppstår en kollisionsskaskad där en del av neutronens kinetiska energi fördelas över atomgittret. Vid tillräckligt höga energier kan atomer permanent lösgöras ur gitterstrukturen och bilda punktdefekter. Höga defektkoncentrationer i sin tur kan drastiskt ändra materialens mekaniska egenskaper bl.a. genom att göra metaller hårda och spröda.

Av såväl säkerhets- som ekonomiskäl måste materialen i en fusionsreaktor klara av konstant bestrålning under långa tider. Ytterligare måste materialen klara av extrema temperaturer och ha en hög värmekonduktivitet så att värmeenergi från reaktorn effektivt kan användas till energiproduktion. För att hindra att plasman förorenas med tyngre grundämnen, bör reaktorväggarna dessutom ha bra resistens mot den eroderande verkan av joner samt neutrala atomer som rymmer från plasman.

Ett av flera föreslagna material är volfram, som har uppvisat utmärkta termiska egenskaper och bra erosionsuthållighet. Volfram används för tillfället i divertern i Joint European Torus (JET) och kommer att användas som ytmaterial för även ITERs diverter, en komponent som har som funktion att extrahera värme och slaggprodukter som annars kunde skada reaktorn. I den här avhandlingen studerar vi ren volfram under neutronstrålning i energiintervallet 1-50 keV. Detta görs med hjälp av molekylodynamiska datorsimulationer, med målet att lägga grunden för defektutvecklingsmodeller över makroskopiska tidsskalor.

2 TEORI

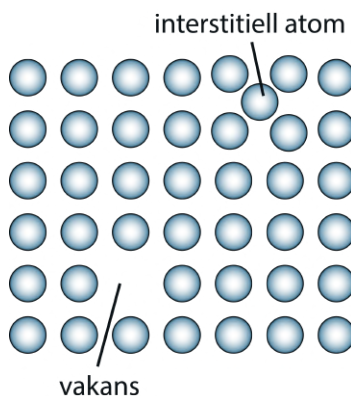
2.1 Volfram

Volfram är en övergångsmetall med en rymdcentrerad kubisk kristallstruktur (Body Centered Cubic, BCC) och en gitterkonstant a på 3,1652 Å. Metallen har en relativt hög atommassa på 183,85 u och besitter den högsta smältpunkten (3695 K) samt den lägsta värmeutvidgningskoefficienten ($4,5 \mu\text{m}/(\text{m}\cdot\text{K})$, vid 300 K) av alla rena metaller. Med sitt relativt höga atomnummer på 74 har volfram också uppvisat bra resistens mot partikelerosion [5, 6].

2.2 Strålningsskador i materia

P.g.a. sin elektriska neutralitet växelverkar neutroner ytterst svagt med materia; för det mesta passerar neutronen oförhindrat rakt igenom atomens elektronhölje. Då en kollision sker, får en atom i kristallgittret, den primära kollisionsatomen (PKA), en plötslig tillsats kinetisk energi som kan få den att frigöras ur sin position i gittret och lämna efter sig en s.k. vakans (figur 1). Den frigjorda gitteratomen kan i sin tur stöta andra atomer ur sina jämviktspositioner och ger således upphov till en kollisionskaskad. Om en av de frigjorda atomerna finner ett nytt grundtillstånd, men på ett annat ställe än i en normal gitterposition (figur 2), kallas den för en interstitiell atom och kombinationen av interstitialen samt vakansen för ett Frenkelpar.

Dessa punktdefekter, vakanser och interstitiella atomer har även som tendens att samla ihop sig till interstitial- och vakanskluster som med tiden kan utvecklas till dislokationer.

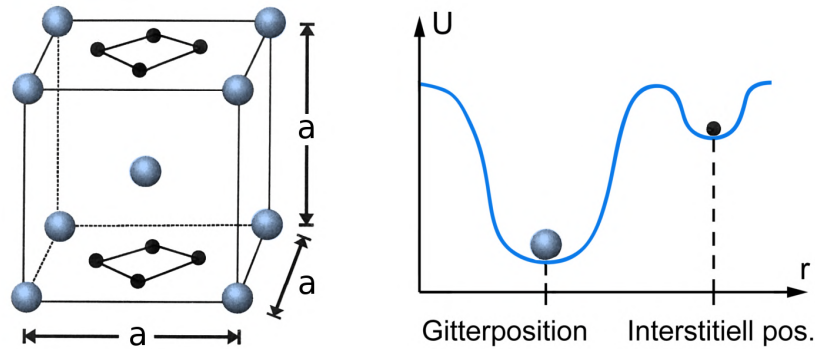


Figur 1: Punktdefekter i ett tvådimensionellt gitter

Dislokationer är linjeformade defekter av storleksordningen $1 \mu\text{m}$ som antingen uppkommer direkt på grund av värmepiken som en kaskad medför eller indirekt genom att mindre defektklustrar kombineras över en längre tid. Emedan gitteratomerna är så gott som fastlåsta på sina platser, är dislokationerna ofta lättrorliga och kan förflytta sig makroskopiska sträckor, men oftast bara i

vissa kristallriktningar. Det här är också orsaken bakom metallers plasticitet, dvs. att de håller sin nya form efter deformation.

I en BCC-enhetscell hittas 24 möjliga interstitiella positioner, fördelade längs den kubiska cellens sidor som i figur 2.



Figur 2: I BCC strukturen hittas $4 \cdot 6 = 24$ möjliga interstitiella positioner av vilka till vänster visas åtta stycken. Grafen till höger är en kvalitativ potentialkurva över gitter- och interstitiella positioner.

Kristalldefekter har visat sig ha en betydande roll i utformandet av materialets mekaniska egenskaper. Kluster av punktdefekter tillsammans med ringformade dislokationsloopar antas bidra till att göra materialet hårt och skört genom s.k. strålningshärdning [7]. Även om dislokationer tillåter materialet att deformeras utan att splittras, fungerar dessa tredimensionella strukturer som hinder för övriga defekters rörlighet och minskar på således materialets elasticitet [8].

Då ett gitter bestrålas med högenergetiska partiklar, kan de sällsynta kollisionerna mellan atomkärnan och neutronen betraktas som elastisk. Utgående från kinetiska energins och rörelsemängdens bevarande kan vi skriva volframatomens energitillskott som

$$\Delta E_W = \frac{\gamma}{2} E_i (1 - \cos(\phi)) \quad (1)$$

där

$$\gamma = \frac{4mM}{(M + m)^2} \quad (2)$$

för en neutron med initiala kinetiska energin E_i samt en volframatom med massan M [7, 9]. Vinkeln ϕ är rekylvinkeln, alltså får vi den största möjliga energiöverföringen då neutronen studsar rakt tillbaka ($\phi = 180^\circ$). Om vi dessutom beaktar träffytans energi- och infallsvinkelberoende, kan vi härleda att volframatomens maximala rekylenergi är

$$\Delta E_{W,max} = \gamma E_i \quad (3)$$

vilket för en 14 MeV neutron ger $\Delta E_{W,max} \approx 300$ keV. (En relativistisk beräkning ger en korrektion på endast ca +2 keV). Sannolikheten för en frontalkrock mellan neutronen och atomkärnan är försvinnande liten och därför kommer energin i praktiken att vara betydligt lägre.

Förutom de mest sannolika elastiska kollisionerna sker också andra typer av kollisioner, bl.a. inelastiska och (n,2n)-reaktioner [9]. I dessa processer bevaras inte den kinetiska energin eftersom volframkärnan blir exciterad eller nya atomkärnor produceras.

Defekter börjar överhuvudtaget uppstå först då rekylen energin överskrider ett tröskelvärde E_d , som för volfram är ca 150 eV [10]. Vi kan alltså dra slutsatsen att de simulerade energierna, 1-50 keV, är lämpliga eftersom de ingår i intervallet $E_d - E_W$.

3 METODER

3.1 Molekyldynamik

Simulationstekniken molekyldynamik härstammar från 1950-talet och hör således till de äldsta beräkningsfysikaliska metoderna [11]. Molekyldynamik grundar sig i stort sett på iterativ, numerisk lösning av flerpartikelproblem för att beräkna de krafter som atomerna i ett system växelverkar med [12].

För ett system av N atomer eller molekyler kan vi ange de enskilda partiklarnas koordinater som

$$q = (q_1, q_2, \dots, q_N) \quad (4)$$

och rörelsemängder som

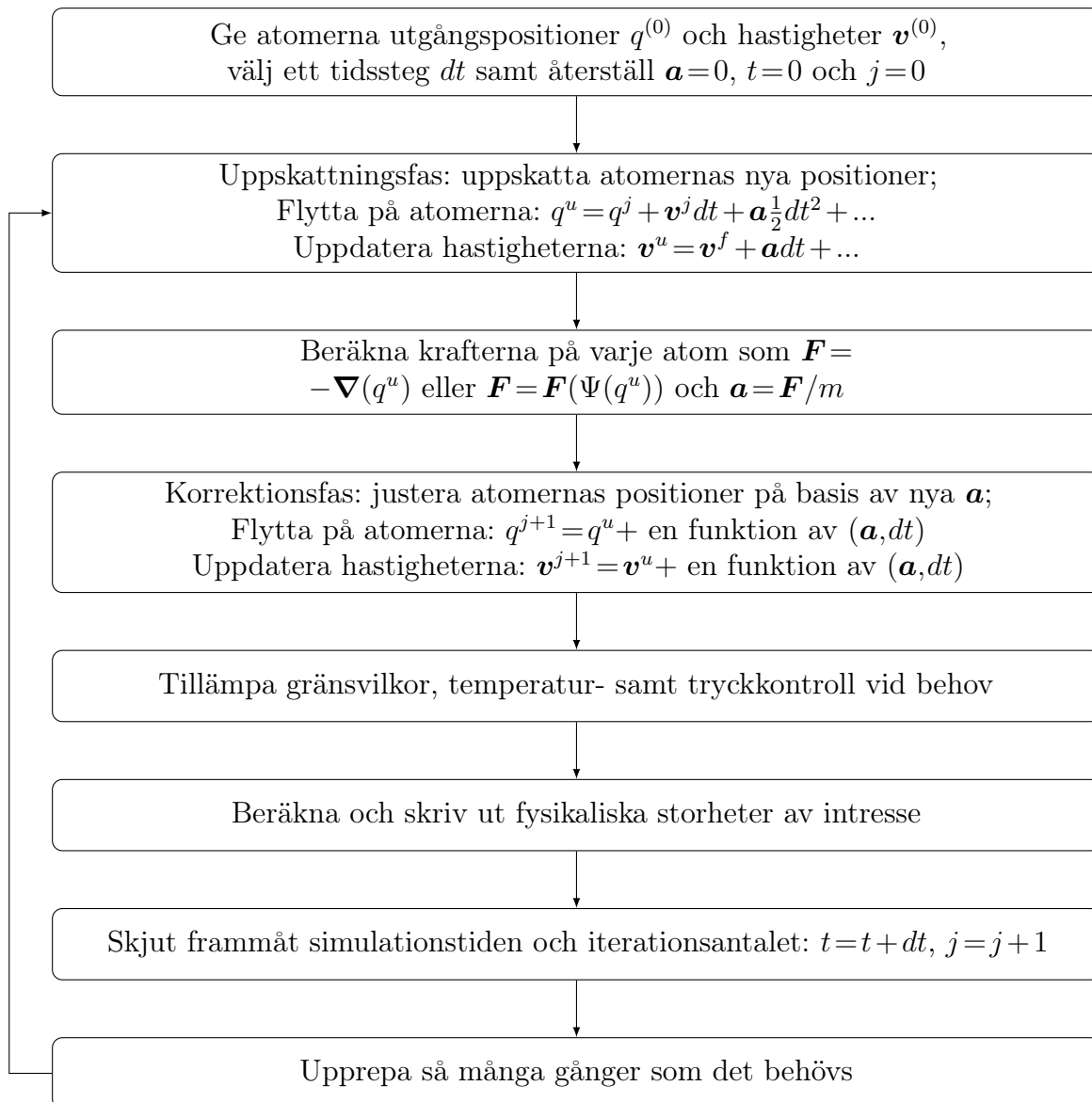
$$p = (p_1, p_2, \dots, p_N) \quad (5)$$

Systemets kinetiska energi antar då formen

$$K = \sum_{i=1}^N \sum_{\alpha} \frac{p_{i\alpha}^2}{m_i} \quad (6)$$

där i är atomens index, m_i dess massa och $p_{i\alpha}$ dess rörelsemängd, så att indexet α löper över rörelsemängdens x , y och z -komponenter.

I början av en simulation förses varje partikel med en slumpmässig rörelsemängd enligt en Boltzmannfördelning för en specifik temperatur. Simulationen framskrider sedan så att man



Figur 3: Ett schema över en typisk MD-simulation. Indexet u anger att storhetens värde är en uppskattning.

iterativt, löser partiklarnas rörelseekvationer för att få uttryck för krafterna och accelerationerna som systemet påverkas av. Efter varje beräkning av rörelseekvationerna tillåter man atomerna röra sig under ett kort tidssteg dt av storleksordningen 1 fs efter vilket beräkningarna upprepas. Denna process beskrivs i mer detalj i figur 3.

3.2 Interatomära potentialer

Potentialenergin för partiklarna i simulationen ges av en s.k. interatomär potential - en lämplig matematisk funktion som konstruerats för att approximera atomernas växelverkningsenergi emellan. Allmänt kan systemets totala potentialenergi ges som

$$V_{tot} = \sum_i^N V_1(\mathbf{r}_i) + \sum_{i,j}^N V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_{i,j,k}^N V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (7)$$

där N är antalet atomer i systemet och V_1 , V_2 och V_3 är funktioner av positionen på en, två och tre atomer [13]. Indexen i , j och k löper över atomernas positioner i tre dimensioner och bör begränsas som $i < j$ och $j < k$ för att hindra att parvisa bindningar räknas dubbelt. Den första termen i ekvation (7) kan slopas då atomerna inte påverkas av ett yttre kraftfält, så vi kan skriva

$$V_{tot} = \sum_i \sum_{j>i} V_2(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j) + \sum_i \sum_{j>i} \sum_{k>j} V_3(\mathbf{r}_i, \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_k) + \dots \quad (8)$$

Antalet termer som behövs för att ge en tillräckligt noggrann approximation varierar.

Speciellt för metaller används ofta s.k. EAM (Embedded Atom Method) potentialer

$$V_{tot} = \sum_i^N F_i \left(\sum_j \rho(\mathbf{r}_{ij}) \right) + \frac{1}{2} \sum_{ij}^N V_2(\mathbf{r}_{ij}) \quad (9)$$

där F_i är en funktion av summan av elektrondensiteten $\rho(\mathbf{r}_{ij})$ och $\mathbf{r}_{ij}$ anger avståndet $|\mathbf{r}_i - \mathbf{r}_j|$ mellan atomerna [14, 15].

I de utförda simulationerna användes en potential som baserar sig på en EAM potential av Derlet et al. [16], men där den repulsiva delen kommer från universella Ziegler-Biersack-Littmark potentialen [17] och har anpassats av Björkas et al. [18]

3.3 Kaskadsimulationerna

De enskilda kollisionkaskaderna simulerades molekylodynamiskt med PARCAS-koden [19] och de utnyttjade skripten och metoderna baserade sig på arbete utfört av Sand et al. [20]. I början av varje simulation genererades först en simulationscell, som sedan relaxerades sedan vid 300 K i 10 ps så att systemet skulle nå ett jämviktsläge. Efter detta gavs en atom nära mitten av cellen en rekyl i en slumpmässig vinkel (kolatitud θ och longitud ϕ). Efter själva kaskadskedet, som varade i omkring 10 ps, tilläts systemet stabilisera sig i ytterligare 30 ps, innan det slutligen kylades ner till nära 0 K under en tid på 10 ps. Hela processen upprepades med 1000 slumpvinklar för varje studerad energi. P.g.a. symmetriskäl, behövde simulationer bara köras för slumpvinklar

i intervallen

$$\theta \in [0, 180^\circ] \quad (10)$$

$$\phi \in [0, 90^\circ] \quad (11)$$

För att simulera omständigheter djupt inne i ett makroskopiskt block av volfram, användes periodiska väggar på simulationscellen, dvs. cellen speglades så att ytteratomerna på motsatta sidor växelverkade med varandra. Därtill kontrollerades systemets temperatur med en Berendsen temperaturkontroll [21] på de yttersta atomerna, för att simulera värmespridning i ett större metallblock. Det här leder dock till att systemet är fysikaliskt bara närmare cellens mitt. T.ex. kommer en atom som rör sig ut från cellen att uppenbara sig på motsatta sidan. En kaskad med alltför hög energi i förhållande till cellstorleken kommer således att passera genom cellen och växelverka med sig själv.

Det ovannämnda scenariot kunde undvikas genom att använda tillräckligt stora simulationsceller samt ytterenergikontroll i Parcas. Kontrollen avslutar automatiskt körningen om en ytteratoms kinetiska energi överskrider en arbiträr gränsnivå, i vårt fall 10 eV. Därtill användes ett skript som efter en misslyckad körning startade om rekylen från en annan atom, längre bort från ytteratomen vars kinetiska energi överskridit gränsen.

Antalet atomer i ett BCC gitter fås som

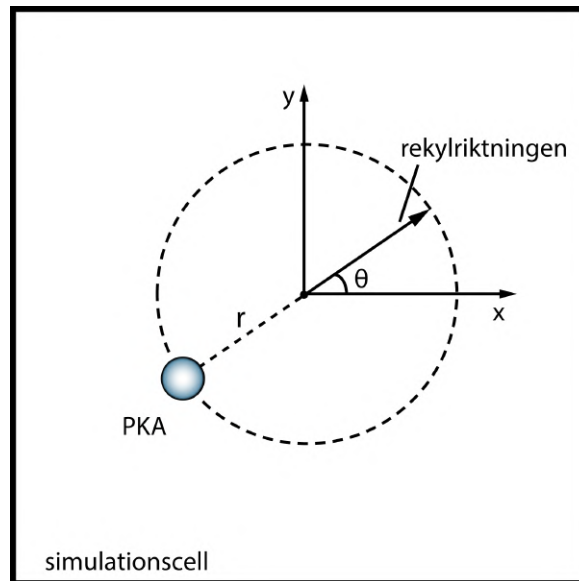
$$N_{\text{atomer}} = 2n_x n_y n_z \quad (12)$$

där n_i är antalet enhetsceller i i -riktningen. Således medför att en ökning från t.ex. en $100 \times 100 \times 100$ - till en $101 \times 101 \times 101$ -simulationscell en tillsats av över 60 000 atomer. Som ett försök att minimera atomantalet och således tiden det tar att köra simulationen användes en typ av dynamisk geometri, där PKA valdes utgående från rekylvinkeln enligt figur 4.

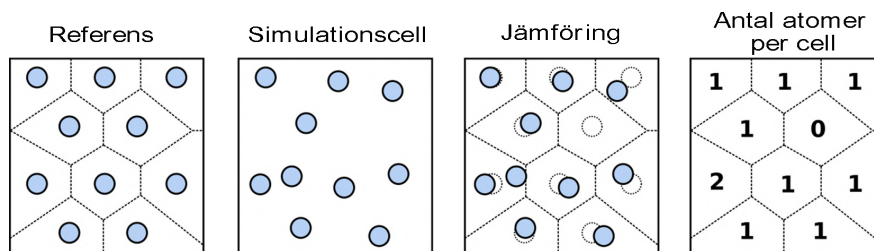
3.4 Analys av data

För att hitta permanenta punktdefekter som bildades för varje kaskad, analyserades det slutliga gittret med Wigner-Seitz cellmetoden [22]. Metoden grundar sig på att simulationscellen med defekter jämförs med en referenscell, i det här fallet ett perfekt BCC gitter. På basis av referenscellen definieras ett system av Voronoiceller så att varje cell endast innehåller en gitteratom (figur 5).

Analysalgoritmen jämför sedan Voronoicellerna med simulationscellen och räknar antalet atomer som varje cell nu innehåller; två atomer innebär en interstitiell atom och noll en vakans.



Figur 4: För att effektivisera användningen av cellvolymen, valdes PKA inte direkt som den atom som är närmast cellens geometriska mittpunkt



Figur 5: En illustration av Wigner-Seitz metoden.

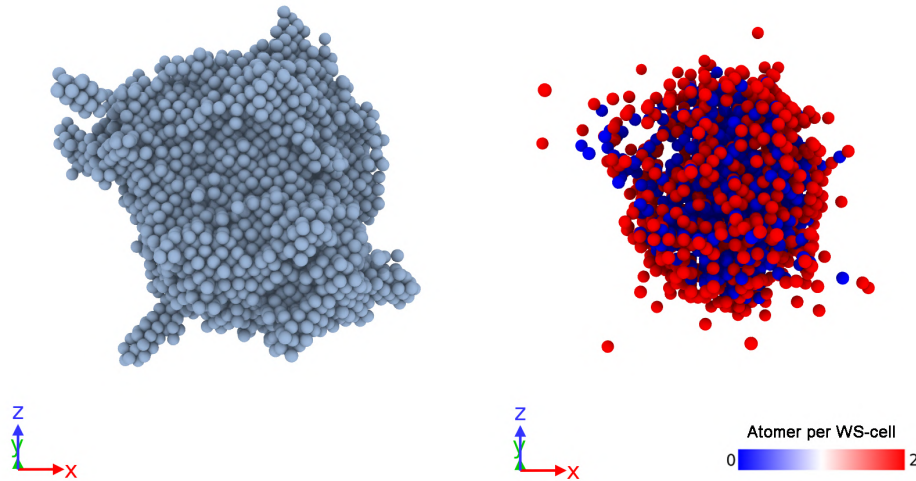
Baserar sig på en figur av A. Stukowski, *Ovito User Manual* <http://ovito.org/>, hämtad 14.8.2017

Efter att enskilda vakanser och interstitialer hade lokaliserats, kördes en klusteranalys med skriptningsgränssnittet i Ovito [23]. Analysen grupperar ihop punktdefekter, som befinner sig inom en viss radie d från varandra, till klustrar. Här användes $d = 3.2 \text{ Å}$ vilket är Ovitots förinställda värde och mycket nära volframs gitterkonstant.

Utdatan från Ovito analyserades slutligen med ett Matlab-skript som beräknade bl.a. defektkoncentrationen som funktion av avståndet från simulationscellens mitt och medeltalet defektlustrar, $V_1, V_2, \dots$ samt $I_1, I_2, \dots$ som bildades per kaskad.

4 RESULTAT

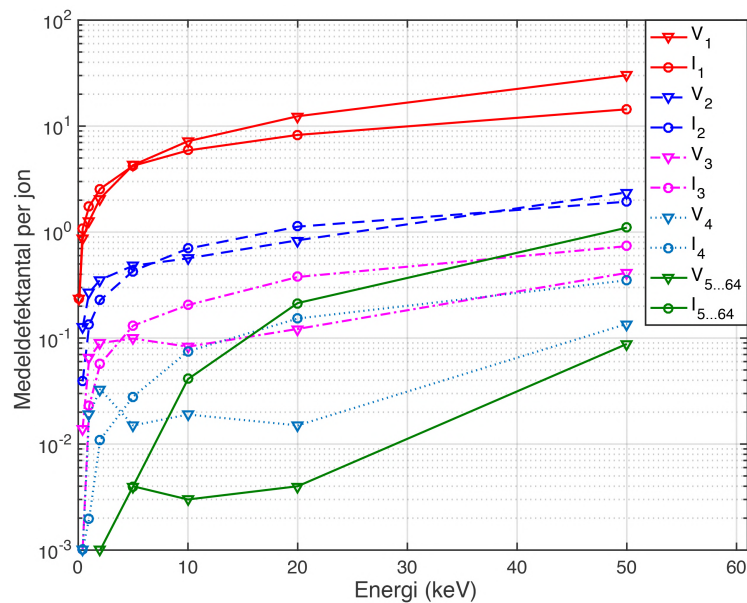
Då kaskaden först börjar sprida sig i materialet, ser vi en skarp ökning i antalet interstitialer och vakanser (figur 8), men dessa rekombineras fort och bara en liten andel blir kvar som permanenta skador i gittret. Vi kan också se att antalet bestående frenkelpar är mycket nära linjärt beroende av rekylenergin. Detta beteende kan även ses ur figur 9, där antalet frenkelpar ritats upp som



Figur 6: Samma 20 keV kaskad visualiserad i Ovito på två olika sätt; i vänstra bilden syns bara atomerna som inte befinner sig i BCC-atompositioner och i högra interstitiella atomer med rött och vakanser med blått

funktion av rekylenergin.

Genom att plotta antalet defektkluster av olika storlekar som funktion av energin (figur 7) kan man konstatera att både klustrens storlek och deras antal ökar då rekylenergin växer.



Figur 7: Antal defekter som återstod efter kaskader med olika energier

Även defekternas fördelning i gittret är energiberoende; i figur 10 har den medeltaliga defektkoncentrationen för 1000 kaskader ritats upp som funktion av avståndet från den primära kollisionssatomen (PKA).

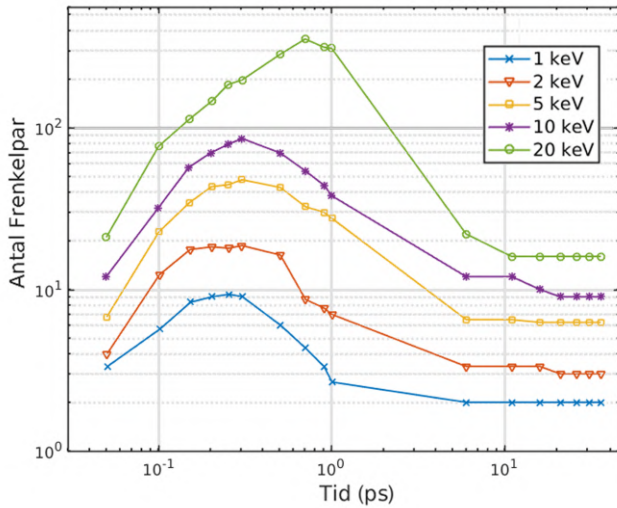


Figure 8: Defektantalet som funktion av tiden

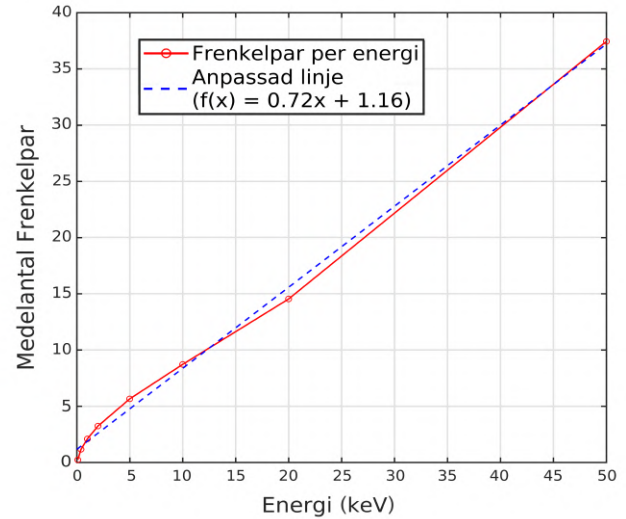


Figure 9: Det slutliga defektantalet som funktion av rekylenergin

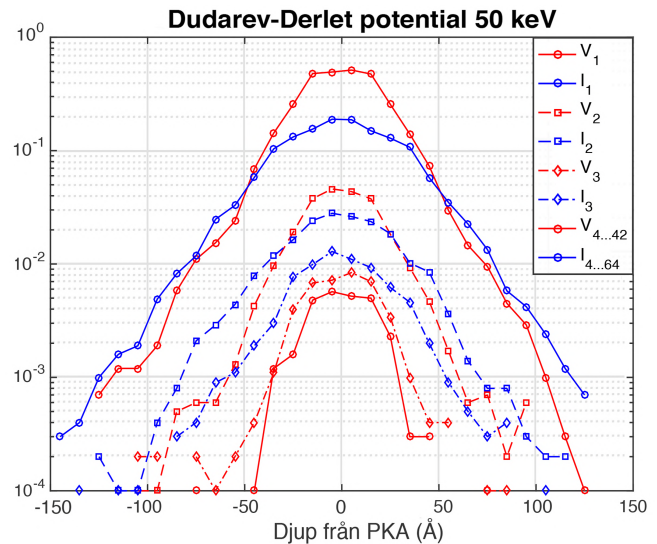
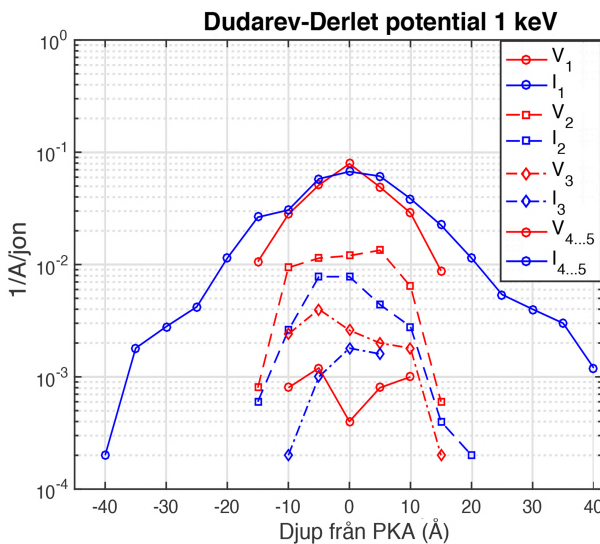


Figure 10: Medeltalig linjär defektfördelning i z-led för 1000 stycken 1 keV- och 50 keV-kaskader

5 SLUTSATSER

I den här avhandlingar studerade vi uppkomsten av punktdefekter i wolfram under neutronstrålning. Utgående från de utförda molekylodynamiska simulationerna kunde vi erhålla data över hur defektantalet var beroende av rekylenergin. Dessutom studerades hur defektkoncentrationen varierade med energin och avståndet från den primära kollisionsatomen. Som slutsats kan man konstatera att defektantalet och storleken på de bildade klustrarna ökar med växande rekylenergi. Därtill uppstår permanenta defekter längre bort från PKA då energin ökar. Om vi bara betraktar antalet punktdefekter eller frenkelpar, ser vi att dessa ökar så gott som linjärt med rekylenergin.

Eftersom vi i simulationerna bara betraktade processer *efter* den egentliga kollisionen mellan PKA och den inkommande partikeln, är resultaten giltiga för såväl neutron- som jonstrålning. För att nå långtidsmålet med studien, nämligen att skapa modeller över defekternas beteende över makroskopiska tidsskalor, krävs ytterligare simulationer med andra verktyg. Exempelvis kunde de numeriska resultaten från denna studie användas i Kinetiska Monte Carlo-modelleringar, för vilka tidsskalan kan vara tiotals år.

REFERENSER

- [1] G. McCracken och P. Stott, *Fusion: the Energy of the Universe*. Academic Press, 2012.
- [2] “A blast of heat for iter’s plasma-facing components,” hämtad: 21.8.2017. [Online]. Tillgänglig: <https://www.iter.org/newsline/251/1436>
- [3] J. K. Shultis och R. E. Faw, *Fundamentals of Nuclear Science and Engineering Third Edition*. CRC press, 2016.
- [4] A. Suri, N. Krishnamurthy, och I. Batra, “Materials issues in fusion reactors,” i *Journal of Physics: Conference Series*, bd. 208. IOP Publishing, 2010, s. 012001.
- [5] H. Bolt, V. Barabash, W. Krauss, J. Linke, R. Neu, S. Suzuki, N. Yoshida, och A. U. Team, “Materials for the plasma-facing components of fusion reactors,” *Journal of Nuclear materials*, bd. 329, ss. 66–73, 2004.
- [6] R. Neu *et al.*, “Tungsten: an option for divertor and main chamber plasma facing components in future fusion devices,” *Nuclear fusion*, bd. 45, nr 3, s. 209, 2005.
- [7] E. Little, “Neutron-irradiation hardening in irons and ferritic steels,” *International Metals Reviews*, bd. 21, nr 1, ss. 25–60, 1976.
- [8] C. Azevedo, “A review on neutron-irradiation-induced hardening of metallic components,” *Engineering Failure Analysis*, bd. 18, nr 8, ss. 1921–1942, 2011.
- [9] G. S. Was, *Fundamentals of radiation materials science: metals and alloys*. Springer, 2016.
- [10] C. Broeders och A. Y. Konobeyev, “Defect production efficiency in metals under neutron irradiation,” *Journal of Nuclear Materials*, bd. 328, nr 2, ss. 197–214, 2004.
- [11] B. Alder och T. Wainwright, “Phase transition for a hard sphere system,” *The Journal of chemical physics*, bd. 27, nr 5, ss. 1208–1209, 1957.

- [12] M. P. Allen och D. J. Tildesley, *Computer simulation of liquids*. Oxford university press, 1989.
- [13] R. LeSar, *Introduction to computational materials science: fundamentals to applications*. Cambridge University Press, 2013.
- [14] M. S. Daw och M. I. Baskes, “Embedded-atom method: Derivation and application to impurities, surfaces, and other defects in metals,” *Phys. Rev. B*, bd. 29, ss. 6443–6453, Jun 1984.
- [15] S. Dudarev och P. Derlet, “A ‘magnetic’ interatomic potential for molecular dynamics simulations,” *Journal of Physics: Condensed Matter*, bd. 17, nr 44, s. 7097, 2005.
- [16] P. M. Derlet, D. Nguyen-Manh, och S. L. Dudarev, “Multiscale modeling of crowdion and vacancy defects in body-centered-cubic transition metals,” *Phys. Rev. B*, bd. 76, s. 054107, Aug 2007.
- [17] J. F. Ziegler, J. Biersack, och U. Littmark, “The stopping and range of ions in matter, vol. 1,” 1, *Pergamon Press, New York*, 1985.
- [18] “Modelling radiation effects using the ab-initio based tungsten and vanadium potentials,” *Nuclear Instruments and Methods in Physics Research Section B: Beam Interactions with Materials and Atoms*, bd. 267, nr 18, ss. 3204 – 3208, 2009, proceedings of the Ninth International Conference on Computer Simulation of Radiation Effects in Solids.
- [19] K. Nordlund, “PARCAS computer code,” *The main principles of the molecular dynamics algorithms are presented in*, bd. 15, s. 47, 2006.
- [20] A. Sand, S. Dudarev, och K. Nordlund, “High-energy collision cascades in tungsten: Dislocation loops structure and clustering scaling laws,” *EPL (Europhysics Letters)*, bd. 103, nr 4, s. 46003, 2013.
- [21] H. J. Berendsen, J. v. Postma, W. F. van Gunsteren, A. DiNola, och J. Haak, “Molecular dynamics with coupling to an external bath,” *The Journal of chemical physics*, bd. 81, nr 8, ss. 3684–3690, 1984.
- [22] K. Nordlund, M. Ghaly, R. Averback, M. Caturla, T. D. de La Rubia, och J. Tarus, “Defect production in collision cascades in elemental semiconductors and fcc metals,” *Physical Review B*, bd. 57, nr 13, s. 7556, 1998.
- [23] A. Stukowski, “Visualization and analysis of atomistic simulation data with ovito—the open visualization tool,” *Modelling and Simulation in Materials Science and Engineering*, bd. 18, nr 1, s. 015012, 2010. [Online]. Tillgänglig: <http://stacks.iop.org/0965-0393/18/i=1/a=015012>