

ОЦЕНКА МЕРЫ СХОЖЕСТИ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК ПО КООРДИНАТАМ ИХ УЗЛОВ В ТРЁХМЕРНОМ ПРОСТРАНСТВЕ

Куприянов А.В.¹, Кириш Д.В.²

¹Институт систем обработки изображений РАН,

²Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет)

Аннотация

В статье рассматривается задача определения схожести кристаллических решёток в трёхмерном пространстве. Приводится описание разработанного метода, основанного на оценивании шести основных параметров, характеризующих элементарную ячейку для каждой из сравниваемых решёток, и вычисления соответствующих мер схожести. Проведён вычислительный эксперимент по массовому сравнению моделей примитивных кристаллических решёток для всех возможных систем и выполнен анализ полученных результатов.

Ключевые слова: кристаллическая решётка, элементарная ячейка Браве, трансляционные векторы, параметры элементарной ячейки, мера схожести.

Введение

Кристаллическая решётка – присущее кристаллам регулярное расположение частиц (атомов, их ядер, ионов, молекул, электронов), характеризующееся периодической повторяемостью в трёх измерениях [1]. Она индивидуальна для каждого вещества и определяет его основные физико-химические свойства.

Несмотря на большое разнообразие кристаллических решёток, существует всего 14 типов элементарных ячеек, выделенных Огюстом Браве, с помощью которых можно образовать любую решётку.

В предыдущих работах по данной тематике [2 и 3] было приведено детальное описание типов базовых решеток Браве, а также основные семь систем, на которые они подразделяются. Для описания элементарной ячейки удобно использовать её геометрическое представление в виде тройки векторов в трёхмерном пространстве. Было показано, что задачи анализа электронных изображений кристаллических решёток, в частности, задача оценивания параметров кристаллической решётки и задача определения типа решётки, являются актуальными для решения многих фундаментальных и прикладных научных задач.

Кристаллическая решётка является дифракционной решёткой для рентгеновских лучей и пучков электронов. В настоящее время самым распространённым способом исследования кристаллических решёток является рентгеновская дифракция [4]. В рентген-дифракционном анализе решение задачи определения типа кристаллической решётки осуществляется путём сравнения оцененных параметров исследуемой решётки с эталонными параметрами [5]. В качестве эталонных могут выступать параметры решёток либо исследованных ранее, либо полученных в результате моделирования. Поэтому для точного определения типа решётки требуется огромная база заранее заданных эталонных параметров.

К наиболее перспективным способам наблюдения кристаллических решёток следует отнести атомно-силовую микроскопию, сканирующую туннельную микроскопию, туннельную электронную микроскопию и просвечивающую электронную

микроскопию [3,6], которые позволяют наблюдать отдельные атомы вещества (рис. 1).



Рис. 1. Изображение графена с гексагональной кристаллической решёткой, полученное в электронном микроскопе высокого разрешения, сторона гексагона – $2,5\text{Å}$, расстояние между атомами углерода (светлые пятна) – $1,44\text{Å}$ [7]

Сложность определения типа кристаллической решётки заключается в проблеме неоднозначности выбора элементарной ячейки. На рис. 2 показаны различные варианты определения элементарной ячейки для двумерной кристаллической решётки.

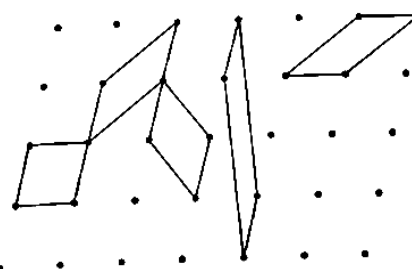


Рис. 2. Варианты представления элементарной ячейки для двумерной решётки

Решётки Браве представляют собой уникальное пространство признаков, которое позволяет разложить любое изображение кристаллических наноструктур на элементарные составляющие. Основой любого из алгоритмов определения параметров будет являться введение меры схожести или способа отождествления между собой двух кристаллических решёток. Особо следует отметить, что такие меры сравнения должны быть инвариантны к повороту, смещению в пространстве и размеру решёток (коли-

честву трансляций по всем направлениям), так как обеспечить равенство этих параметров у исследуемых кристаллических решёток невозможно.

В настоящей работе описывается новый подход и приводятся результаты определения схожести решёток.

1. Методы сравнения кристаллических решёток

Среди основных методов определения схожести кристаллических решёток можно выделить следующие: компаратор Национального Института стандартов и технологий [8], сравнение эффективности упаковки решётки [9] и способ сравнения с использованием изоповерхностей [10]. Приведём краткую характеристику методов.

1) Принцип определения схожести принят в Национальном Институте стандартов и технологий. Схема работы метода приведена на рис. 3.

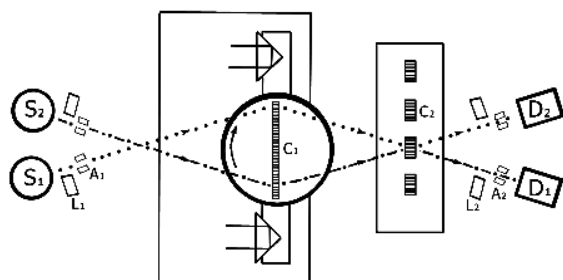


Рис. 3. Схема компаратора кристаллических решёток: L1, L2 – затворы; A1, A2 – апертуры; C1, C2 – кристаллы; D1, D2 – детекторы [8]

Анализируемый кристалл C1 вращают вокруг одной из его осей. Затворы попеременно пропускают или блокируют прохождение рентгеновских лучей (изображены пунктирными линиями). Далее лучи проходят через кристалл C2, с которым осуществляется сравнение. Изображения, полученные с использованием обоих лучей, записываются одновременно. Если межплоскостные расстояния кристаллов C1 и C2 различны, то возникает угловое смещение между дифракционными картинками, полученными на детекторах. По величине углового смещения находится разность межплоскостных расстояний, которая и принимается в качестве меры схожести: $\Delta d = d_1 - d_2$.

Основными недостатками данного метода являются: высокая погрешность измерения межплоскостного расстояния (порядка 100Å) и необходимость последовательного сравнения со всеми доступными физическими образцами.

2) В методе сравнения эффективности упаковки элементарные ячейки представляются в виде плотных упаковок шаров (рис. 4).

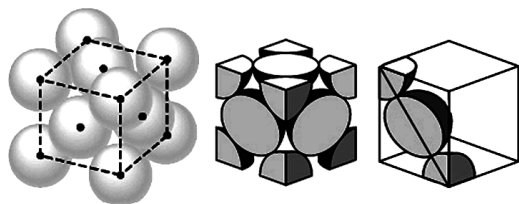


Рис. 4. Определение упаковки атомов в ячейке [9]

Вводится понятие эффективности упаковки:

$$APF = \frac{\text{Volume of atoms in unit cell}}{\text{Volume of unit cell}}$$

В качестве меры схожести принимается абсолютная разность эффективностей упаковки сравниваемых решёток.

Такой подход применим только в случае определения меры схожести решёток с сильно различающейся степенью упаковки атомов, например, кубических – $APF \approx 78,54\%$ и гексагональных – $APF \approx 90,69\%$. С помощью этого метода возможно отделение центрированных решёток от примитивных.

3) Способ сравнения, основанный на построении изоповерхностей. Для выделенной элементарной ячейки методом триангуляции строится изоповерхность, окружающая ячейку так, что каждый узел должен оказаться внутри изоповерхности. Таким образом, изоповерхность S для ячейки решётки представляет собой сетку точек $p_j, j = \overline{1, N}$.

Для определения степени схожести двух изоповерхностей S и S', построенных для разных ячеек, вычисляется одна из двух мер схожести: CKO расстояний между изоповерхностями – $RMS(S, S')$ или расстояние Хаусдорфа – $d_H(S, S')$:

$$RMS(S, S') = \frac{\sqrt{d(p'_1, S)^2 + \dots + d(p'_M, S)^2}}{M}$$

$$d_H(S, S') = \max_{p \in S} [d(p, S')]$$

$$\text{где } d(p, S') = \min_{p'_k \in S'} \|p - p'_k\|, p \in S,$$

$$d(p', S) = \min_{p_k \in S} \|p_k - p'\|, p' \in S'.$$

В описанном подходе основной проблемой является необходимость начального совмещения решёток, при этом метод даёт большую погрешность при сравнении трёхмерных решёток, схожих по объёму.

2. Алгоритм сравнения по параметрам решётки

Предлагаемый в настоящей работе алгоритм свободен от перечисленных недостатков. Он позволяет вычислять меру схожести для двух произвольных решёток. С целью обеспечения наилучшего совмещения решёток осуществляется их разворот в пространстве и переориентация относительно осей координат.

Суть алгоритма заключается в сравнении значений шести основных параметров элементарной ячейки Браве: длин трёх сторон (l_1, l_2, l_3) и углов между сторонами ($\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$).

Входными данными является упорядоченное произвольным образом множество радиус-векторов, задающих положение узлов кристаллической решётки в пространстве:

$$A = \{\bar{a}_k\}_{k=1}^N, \bar{a}_k = (a_{k1}, a_{k2}, a_{k3})^T \in \mathbb{R}^3.$$

Для решения проблемы неоднозначности выбора элементарной ячейки в разработанном методе предлагается использовать критерий минимального периметра ячейки:

$$\left(|\bar{b}_1| + |\bar{b}_2| + |\bar{b}_3| \right) \xrightarrow{\{\bar{b}_1, \bar{b}_2, \bar{b}_3\} \in D} \min, \quad (1)$$

где D – множество, элементами которого являются тройки некопланарных ненулевых векторов от выбранного центрального узла до произвольного узла решётки.

Тогда получаем для определения параметров элементарной ячейки:

$$l_1 = |\bar{b}_1|, l_2 = |\bar{b}_2|, l_3 = |\bar{b}_3|, \\ \alpha_1 = \bar{b}_1 \wedge \bar{b}_2, \alpha_2 = \bar{b}_1 \wedge \bar{b}_3, \alpha_3 = \bar{b}_2 \wedge \bar{b}_3.$$

Опишем алгоритм определения основных параметров элементарной ячейки Браве:

- 1) Выделяем центральный узел с радиус-вектором $\bar{g}_c \in A$ на основании следующего критерия:

$$\left| \frac{1}{N} \sum_{k=1}^N \bar{a}_k - \bar{g}_c \right| \xrightarrow{\bar{g}_c \in A} \min.$$

- 2) Центрируем всё множество узлов решётки относительно выбранного центрального узла. Получаем новое множество радиус-векторов узлов:

$$A^I = \{\bar{a}_k^I\}_{k=1}^N = \{\bar{a}_k - \bar{g}_c\}_{k=1}^N.$$

- 3) Находим узел с минимальной длиной радиус-вектора $\bar{g}_1 \in A^I$. Этот радиус-вектор будет первым ребром элементарной ячейки.
- 4) Переводим радиус-вектор \bar{g}_1 в плоскость XOY путём поворота радиус-вектора вокруг оси OY на угол φ .

$$\varphi = \text{sign}(g_{13}) \cdot \arccos\left(g_{11} / \sqrt{(g_{11})^2 + (g_{13})^2} \right). \quad (2)$$

- 5) Осуществляем поворот всех радиус-векторов из множества A^I вокруг оси OY на угол φ , найденный по формуле (2). Для этого используем матрицу поворота вокруг оси OY:

$$M_Y(\varphi) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & 0 & \sin \varphi \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \varphi & 0 & \cos \varphi \end{pmatrix}.$$

- 6) Получаем новое множество радиус-векторов узлов:

$$A^{II} = \{\bar{a}_k^{II}\}_{k=1}^N = \{M_Y(\varphi) \cdot \bar{a}_k^I\}_{k=1}^N.$$

- 7) Совмещаем радиус-вектор \bar{g}_1 с осью OX. Выполняем это путём поворота радиус-вектора вокруг оси OZ на угол ψ .

$$\psi = -\text{sign}(g_{12}) \cdot \arccos\left(g_{11} / \sqrt{(g_{11})^2 + (g_{12})^2} \right). \quad (3)$$

- 8) Осуществляем поворот всех радиус-векторов из множества A^{II} вокруг оси OZ на угол ψ , найденный по формуле (3). Для этого используем матрицу поворота вокруг оси OZ:

$$M_Z(\psi) = \begin{pmatrix} \cos \psi & -\sin \psi & 0 \\ \sin \psi & \cos \psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

- 9) Получаем новое множество радиус-векторов узлов:

$$A^{III} = \{\bar{a}_k^{III}\}_{k=1}^N = \{M_Z(\psi) \cdot \bar{a}_k^{II}\}_{k=1}^N.$$

- 10) Находим узел с радиус-вектором $\bar{g}_2 \in A^{III}$, имеющим минимальную длину и удовлетворяющим условию $\bar{g}_2 \times \bar{X} \neq 0$. Этот вектор будет вторым ребром элементарной ячейки.

- 11) Переводим радиус-вектор \bar{g}_2 в плоскость XOY. Выполняем это путём поворота радиус-вектора вокруг оси OX на угол θ .

$$\theta = -\text{sign}(g_{23}) \cdot \arccos\left(g_{22} / \sqrt{(g_{22})^2 + (g_{23})^2} \right). \quad (4)$$

- 12) Осуществляем поворот всех радиус-векторов из множества A^{III} вокруг оси OX на угол θ , найденный по формуле (4). Для этого используем матрицу поворота вокруг оси OX:

$$M_X(\theta) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \cos \theta & -\sin \theta \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}.$$

- 13) Получаем новое множество радиус-векторов узлов:

$$A^{IV} = \{\bar{a}_k^{IV}\}_{k=1}^N = \{M_X(\theta) \cdot \bar{a}_k^{III}\}_{k=1}^N.$$

- 14) Находим узел с радиус-вектором $\bar{g}_3 \in A^{IV}$, имеющим минимальную длину и удовлетворяющим условию $g_{33} \neq 0$. Этот вектор будет третьим ребром элементарной ячейки.

- 15) Вычисляем шесть параметров по выделенным рёбрам:

$$l_1 = |\bar{g}_1|; l_2 = |\bar{g}_2|; l_3 = |\bar{g}_3|; \\ \alpha_1 = \bar{g}_1 \wedge \bar{g}_2; \alpha_2 = \bar{g}_1 \wedge \bar{g}_3; \alpha_3 = \bar{g}_2 \wedge \bar{g}_3.$$

3. Определение меры схожести

Для каждого из двух сравниваемых множеств узлов решёток A_1 и A_2 с помощью алгоритма, описанного в пункте 2, можно определить основные параметры элементарной ячейки Браве:

$$A_1: \bar{l} = (l_1, l_2, l_3), \bar{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3);$$

$$A_2: \bar{l}' = (l'_1, l'_2, l'_3), \bar{\alpha}' = (\alpha'_1, \alpha'_2, \alpha'_3).$$

Введём две нормированные меры, показывающие схожесть сторон и схожесть углов двух элементарных ячеек Браве.

Мера схожести сторон (принимает максимальное значение, равное единице, когда длины сторон полностью совпадают):

$$\|\bar{l} - \bar{l}'\| = 1 - \frac{\sqrt{(l_1 - l_1')^2 + (l_2 - l_2')^2 + (l_3 - l_3')^2}}{\max\{\sqrt{(l_1')^2 + (l_2')^2 + (l_3')^2}, \sqrt{(l_1)^2 + (l_2)^2 + (l_3)^2}\}}$$

Мера схожести углов (принимает максимальное значение, равное единице, когда величины углов полностью совпадают):

$$\|\bar{\alpha} - \bar{\alpha}'\| = 1 - \max\{\sin(|\alpha_1 - \alpha_1'|), \sin(|\alpha_2 - \alpha_2'|), \sin(|\alpha_3 - \alpha_3'|)\}$$

Для анализа эффективности введённых мер проведём ряд вычислительных экспериментов по сравнению между собой моделей кристаллических решёток, относящихся к различным системам решёток Браве.

4. Результаты экспериментальных исследований

Исходными данными для экспериментов были 1400 решёток, полученных методом имитационного моделирования, по 200 решёток для каждой из семи систем: триклинной – *aP*, моноклинной – *mP*, ромбической – *oP*, тригональной – *hR*, тетрагональной – *tP*, гексагональной – *hP*, кубической – *cP*. Длины сторон и величины углов определялись в соответствии с законом равномерного случайного распределения.

Каждая решётка попарно сравнивалась со всеми остальными: две решётки считались похожими по сторонам или углам, если значение соответствующей меры схожести было не меньше 0,95. Выбор данного порогового значения связан с тем, что в настоящее время ошибка определения параметров решётки составляет не менее 5% [6].

Особый интерес представляют решётки, элементарные ячейки которых различаются только по сторонам или только по углам. Такие решётки должны определяться как похожие при вычислении той меры схожести, которая соответствует совпадающим параметрам.

В первом эксперименте сравнение двух решёток велось только по значению меры схожести сторон. Результаты эксперимента представлены в табл. 1.

Таблица 1. Вероятность точной идентификации решёток при сравнении сторон

Сравниваемая ячейка	Эталонная ячейка						
	<i>aP</i>	<i>mP</i>	<i>oP</i>	<i>tP</i>	<i>cP</i>	<i>hR</i>	<i>hP</i>
<i>aP</i>	26	23	22	12	3	3	11
<i>mP</i>	23	26	23	12	2	2	12
<i>oP</i>	22	23	24	13	3	3	12
<i>tP</i>	14	13	15	22	8	8	20
<i>cP</i>	4	2	3	8	38	35	10
<i>hR</i>	3	2	3	7	35	40	10
<i>hP</i>	13	13	14	19	10	9	22

Данные в таблицах показывают, какой в среднем процент из всех *сравниваемых ячеек* (тип указан в

верхней части таблицы) имеет схожесть более 95% с выбранной *эталонной ячейкой* (тип указан в левой части таблицы). Таким образом, сумма значений в каждой строке равна 100%. В результате, большее число в ячейке таблицы (выделено более тёмной заливкой ячейки) означает большую вероятность совпадения типов сравниваемой и эталонной решёток. Например, множество решёток, совпавших с одной из триклинных – *aP*, состоит, в среднем, из триклинных на 26%, моноклинных на 23%, ромбических на 22%, тетрагональных на 12%, кубических на 3%, тригональных на 3% и гексагональных на 11%.

По данным табл. 1, из всего множества систем решёток Браве действительно можно выделить две следующие обособленные группы: (триклинная, моноклинная, ромбическая) и (кубическая, тригональная).

Во втором эксперименте сравнение двух решёток велось только по значению меры схожести углов. Результаты эксперимента представлены в табл. 2.

Таблица 2. Вероятность точной идентификации решёток при сравнении углов

Сравниваемая ячейка	Эталонная ячейка						
	<i>aP</i>	<i>mP</i>	<i>oP</i>	<i>tP</i>	<i>cP</i>	<i>hR</i>	<i>hP</i>
<i>aP</i>	80	9	0	0	0	11	0
<i>mP</i>	9	79	3	3	3	2	1
<i>oP</i>	0	3	32	31	31	3	0
<i>tP</i>	0	3	31	32	31	3	0
<i>cP</i>	0	3	31	31	32	3	0
<i>hR</i>	7	1	3	3	3	83	0
<i>hP</i>	0	1	0	0	0	0	99

По данным табл. 2, также можно выделить обособленную группу – (ромбическая, тетрагональная, кубическая). Такой результат может быть объяснён тем, что углы трёх данных систем одинаковы и равны 90 градусам. Отметим, что ввиду своей характерной особенности для угла, равного 120 градусам, принадлежность к гексагональной системе решёток определяется практически точно.

На основании данных табл. 1 и 2 можно сделать вывод о том, что разбиение всех кристаллических решёток Браве на семь систем не является однородным и разделимым при использовании введённых мер схожести сторон и углов.

В результате для более точного определения типа решётки с использованием методов классификации возникает необходимость одновременного применения обеих мер схожести. Для этого был проведён третий эксперимент, в котором две решётки считались похожими, если значения обеих мер схожести были меньше 0,95. Его результаты представлены в табл. 3.

Для кубических решёток было получено максимальное увеличение точности определения: с 32-38% до 75% (т.е. в 2 раза). Однако и в этом случае сохраняется обособленная группа (ромбическая, тетрагональная, кубическая), которая значительно затрудняет определение типа решётки при использовании какого бы то ни было классификатора.

Таблица 3. Вероятность точной идентификации решёток при сравнении сторон и углов

Сравниваемая ячейка	Эталонная ячейка						
	<i>aP</i>	<i>mP</i>	<i>oP</i>	<i>iP</i>	<i>cP</i>	<i>hR</i>	<i>hP</i>
<i>aP</i>	94	5	0	0	0	1	0
<i>mP</i>	5	86	5	3	0	0	1
<i>oP</i>	0	4	60	30	6	0	0
<i>iP</i>	0	3	33	58	15	1	0
<i>cP</i>	0	0	6	15	75	4	0
<i>hR</i>	1	0	0	1	4	94	0
<i>hP</i>	0	1	0	0	0	0	99

Заключение

Таким образом, мы пришли к выводу, что даже одновременного сравнения углов и сторон элементарной ячейки недостаточно для точного определения принадлежности произвольной решётки к одной из семи систем решёток Браве. Отсюда возникает необходимость выделить какие-либо дополнительные параметры элементарной ячейки (например, объём, занимаемый ячейкой, плотность упаковки и т.п.) и ввести на их основе новые дополнительные меры для определения степени схожести решёток.

Благодарности

Работа выполнялась при поддержке ФЦП «Научные и научно-педагогические кадры инновационной России» (госконтракт № 02.740.11.0841, соглашения № 8027, 8231), гранта РФФИ 12-01-00237-а, гранта Президента РФ поддержки ведущей научной школы НШ-4128.2012.9, программы фундаментальных исследований РАН-ОНИТ6, в рамках выполнения государственного задания № 8.3195.2011 Минобрнауки РФ.

Литература

1. Физическая энциклопедия: в 5-ти томах / под редакцией А.М. Прохорова и др. – М.: Советская энциклопедия, 1988.
2. Куприянов, А.В. Анализ текстур и определение типа кристаллической решётки на наномасштабных изображениях / А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 3. – С. 128-135.
3. Соифер, В.А. Анализ и распознавание наномасштабных изображений: Традиционные подходы и новые постановки задач / В.А. Соифер, А.В. Куприянов // Компьютерная оптика. – 2011. – Т. 35, № 2. – С. 136-144.
4. Брандон, Д. Микроструктура материалов. Методы исследования и контроля / Д. Брандон, У. Каплан. – М.: Техносфера, 2004. – 384 с.
5. Hammond, C. The Basic of Crystallography and Diffraction. Third Edition / C. Hammond // Oxford University Press Inc., 2009. – 449 p.

6. Эгертон, Р.Ф. Физические принципы электронной микроскопии / Р.Ф. Эгертон. – М.: Техносфера, 2010. – 304 с.
7. Hernandez, Y. Aberration-corrected HRTEM image of a graphene monolayer obtained by exfoliation of graphite in liquid phase / Y. Hernandez, V. Nicolosi [et al.] // Nature Nanotechnology. – 2008. – N. 3(9). – P. 563-568.
8. Kessler, E.G. Precision Comparison of the Lattice Parameters of Silicon Monocrystals / E.G. Kessler, A. Henins, R.D. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, №1. – P. 1-18.
9. Smith, William F. Foundations of Materials Science and Engineering / William F. Smith // McGraw-Hill Education, 2004. – 864 p.
10. Patera, J. Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of Algorithm. – 2005. – P. 309-319.

References

1. Physical encyclopedia in 5 volumes / edited by A.M. Prochorova et al. – Moscow: “Soviet encyclopedia Publisher”, 1988. – (in Russian).
2. Kupriyanov, A.V. Texture analysis and identification of the crystal lattice type upon the nanoscale images / A.V. Kupriyanov // Computer Optics. – 2011. – V. 35, № 3. – P. 128-135. – (in Russian).
3. Soifer, V.A. Analysis and recognition of the nanoscale images: conventional approach and novel problem statement / V.A. Soifer, A.V. Kupriyanov // Computer Optics. – 2011. – V. 35, № 2. – P. 136-144. – (in Russian).
4. Brandon, D. Microstructure of materials. Methods of research and monitoring / D. Brandon, U. Kaplan. – Moscow: “Technosphere Publisher”, 2004. – 384 p. – (in Russian).
5. Hammond, C. The Basic of Crystallography and Diffraction. Third Edition / C. Hammond. – Oxford University Press Inc., 2009. – 449 p.
6. Egerton, R. Physical Principles of Electron Microscopy / Ray F. Egerton – Moscow: “Technosfera Publisher”, 2010. – 304 p. – (in Russian).
7. Hernandez, Y. Aberration-corrected HRTEM image of a graphene monolayer obtained by exfoliation of graphite in liquid phase / Y. Hernandez, V. Nicolosi [et al.] // Nature Nanotechnology. – 2008. – N. 3(9). – P. 563-568.
8. Kessler, E.G. Precision Comparison of the Lattice Parameters of Silicon Monocrystals / E.G. Kessler, A. Henins, R.D. Deslattes, L. Nielsen, M. Arif // Journal of Research of the National Institute of Standards and Technology. – 1994. – Vol. 99, №1. – P. 1-18.
9. Smith, William F. Foundations of Materials Science and Engineering / William F. Smith // McGraw-Hill Education, 2004. – 864 p.
10. Patera, J. Centered cubic lattice method comparison / J. Patera, V. Skala // Proceedings of Algorithm. – 2005. – P. 309-319.

ESTIMATING THE SIMILARITY MEASURE OF CRYSTAL LATTICES BY COORDINATES OF THEIR NODES IN THREE-DIMENSIONAL SPACE

A.V. Kupriyanov¹, D.V. Kirsh²

¹ Image Processing Systems Institute of the RAS,

² S.P. Korolyov Samara State Aerospace University (National Research University)

Abstract

In presented paper the problem of determining the similarity measure of crystal lattices in three-dimensional space is considered. The description the developed method is presented. The algorithm is based on determining the six basic parameters of elementary cell for each of the compa-

nable pair of lattices and calculating the corresponding metrics of similarity. By using this method, an experiment on mass comparison of the crystal lattices of all systems is carried out and the analysis of derived results is fulfilled.

Key words: crystal lattice, Bravais cell, translational vectors, basic parameters of elementary cell, similarity measure.

Сведения об авторах

Сведения об авторе Куприянов Александр Викторович – см. стр. 589 этого номера.



Кирш Дмитрий Викторович, 1990 года рождения. В 2012 году получил степень бакалавра по направлению «Прикладная математика и информатика». В настоящее время является студентом магистратуры факультета информатики Самарского государственного аэрокосмического университета. Круг научных интересов включает цифровую обработку изображений, способы математического описания и сравнения кристаллических решёток, классификацию кристаллических решёток.

E-mail: limitk@mail.ru.

Dmitriy Viktorovich Kirsh, (b. 1990), graduated (2012) with a bachelor's degree in applied mathematics and informatics. At present he is a student of MA course at the S.P. Korolyov Samara State Aerospace University. The area of interests includes digital image processing, methods of mathematical formulation and comparison of crystal lattices, classification of crystal lattices.

Поступила в редакцию 22 октября 2010 г.