

УДК 519.6

## ИДЕНТИФИКАЦИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТОК НА ОСНОВЕ ОЦЕНИВАНИЯ ПАРАМЕТРОВ ЭЛЕМЕНТАРНЫХ ЯЧЕЕК

© 2014 Д. В. Кирш

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

В статье рассматривается задача идентификации кристаллических решёток, представленных набором узлов в трёхмерном пространстве. Для решения задачи разработаны два инвариантных к расположению решётки в пространстве метода идентификации на основе оценивания параметров элементарных ячеек. Первый метод основан на вычислении и сравнении шести основных параметров элементарной ячейки Браве: трёх длин сторон ячейки и трёх величин углов между сторонами. Второй метод основан на вычислении и сравнении объёмов ячеек Вигнера–Зейтца с помощью метода Монте–Карло. В обоих методах введены нормированные меры схожести для вычисленных параметров: меры схожести сторон и углов для элементарных ячеек Браве и мера схожести объёмов для ячеек Вигнера–Зейтца. С использованием разработанных методов был проведён ряд вычислительных экспериментов по идентификации кристаллических решёток. В ходе экспериментов были определены, во-первых, зависимость точности определения объёма ячейки Вигнера–Зейтца от количества вбрасываемых точек, и во-вторых, вероятности точной идентификации решёток основных систем решёток Браве при сравнении различных наборов оценённых параметров. Основным результатом проведённых экспериментов стало преодоление рубежа в 95 % точности идентификации сразу для четырёх систем решёток Браве.

*Параметры элементарной ячейки, вычисление объёма ячейки Вигнера–Зейтца, метод Монте–Карло, мера схожести.*

### Введение

С развитием сканирующей электронной микроскопии появилась возможность непосредственно наблюдать кристаллическую решётку – присущее кристаллам правильное расположение частиц. Она индивидуальна для каждого вещества и определяет его основные физико-химические свойства.

Существует ряд способов, позволяющих описать кристаллическую решётку. Наиболее распространённым является способ, предложенный Огюстом Браве [1]. Однако у такого описания есть ряд недостатков. Во-первых, элементарная ячейка Браве не всегда представляет симметрию кристалла. Во-вторых, возникает проблема неоднозначности выбора элементарной ячейки. Способ описания кристаллической решётки, лишённый описанных недостатков, был предложен Юджином Вигнером и Фредериком Зейтцем [2].

Одной из основных задач рентгенодифракционного анализа является иден-

тификация кристаллической решётки. Как правило, решение данной задачи осуществляется путём сравнения оценённых параметров исследуемой решётки с эталонными параметрами. В качестве эталонных могут выступать параметры решёток, либо исследованных ранее, либо полученных в результате моделирования. Поэтому для точной идентификации решётки требуется большая база заранее заданных эталонных параметров.

Среди основных методов идентификации кристаллических решёток можно выделить следующие: компаратор Национального Института стандартов и технологий, идентификация на основе сравнения эффективности упаковки решётки и идентификация на основе сравнения расстояний между изоповерхностями [3].

Основными недостатками перечисленных методов являются либо высокая погрешность (для компаратора НИСТ порядка 100Å при измерении межплоскостных расстояний), либо низкая эффективность при сравнении решёток, схожих по

форме (для двух других методов идентификации).

Предлагаемые алгоритмы свободны от перечисленных недостатков. Они позволяют вычислять меру схожести для двух произвольных решёток. Особо следует отметить, что введённые меры схожести являются инвариантными к повороту, смещению в пространстве и размеру решёток (количеству трансляций по всем направлениям), так как обеспечить равенство этих параметров у исследуемых кристаллических решёток невозможно.

### Модели кристаллических решёток

Элементарная ячейка Браве характеризуется набором из шести параметров: длинами трёх сторон  $l_1, l_2, l_3$  и величинами трёх углов между сторонами  $\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3$  (рис. 1).

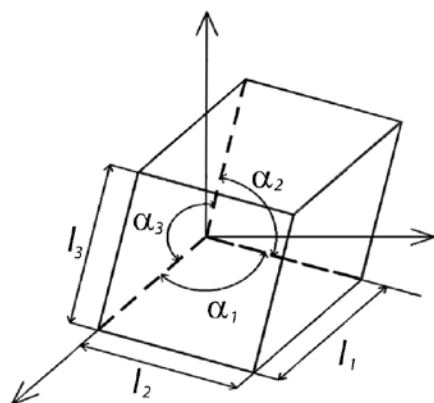


Рис. 1. Основные параметры элементарной ячейки Браве

Все решётки Браве делятся на семь основных систем. Характеристики их элементарных ячеек представлены в табл. 1.

Ячейка Вигнера–Зейтца характеризуется набором векторов-нормалей, проведённых к ограничивающим плоскостям.

Для построения ячейки Вигнера–Зейтца выбирается произвольный узел решётки и соединяется со всеми ближайшими соседними узлами. Через середины этих отрезков проводятся перпендикулярные отрезкам плоскости. Ограниченная область будет являться ячейкой Вигнера–Зейтца.

Ячейка Вигнера–Зейтца для трёхмерной кристаллической решётки представляет собой многогранник, содержащий внутри себя один узел решётки (рис. 2).

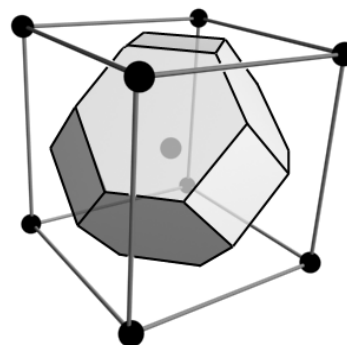


Рис. 2. Вид ячейки Вигнера–Зейтца для кубической объёмно-центрированной решётки

Таблица 1. Характеристики элементарных ячеек основных систем решёток Браве

Название	Символ	Длины сторон	Углы
Триклинная	$aP$	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 \neq \alpha_2 \neq \alpha_3$
Моноклиная	$mP$	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = 90^\circ \neq \alpha_3$
Ромбическая	$oP$	$l_1 \neq l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Тетрагональная	$tP$	$l_1 = l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Кубическая	$cP$	$l_1 = l_2 = l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$
Тригональная	$hR$	$l_1 = l_2 = l_3$	$\alpha_1 = \alpha_2 = \alpha_3 \neq 90^\circ$
Гексагональная	$hP$	$l_1 = l_2 \neq l_3$	$\alpha_1 = 120^\circ; \alpha_2 = \alpha_3 = 90^\circ$

Ячейка Вигнера–Зейтца обладает следующими особенностями:

1. Она полностью повторяет симметрию решётки.
2. Ограниченная ею область содержит все точки, лежащие ближе к центральному узлу ячейки, чем к какому-либо другому узлу решётки.

### Метод идентификации решёток на основе сравнения параметров элементарной ячейки Браве

Исходными данными метода идентификации является массив радиус-векторов узлов:

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

Для нахождения шести основных параметров элементарной ячейки Браве был разработан следующий алгоритм:

1. Центрируем всю решётку.
2. Совмещаем радиус-вектор минимальной длины  $\bar{g}_1$  с осью  $OX$ .
3. Переводим радиус-вектор минимальной длины  $\bar{g}_2$  ( $\bar{g}_2 \times \bar{X} \neq 0$ ) в плоскость  $XOY$ .
4. Находим узел с радиус-вектором  $\bar{g}_3$  ( $g_{33} \neq 0$ ) минимальной длины.
5. Вычисляем параметры элементарной ячейки Браве:

$$\bar{l} = (l_1, l_2, l_3) = (|\bar{g}_1|, |\bar{g}_2|, |\bar{g}_3|);$$

$$\bar{\alpha} = (\alpha_1, \alpha_2, \alpha_3) = (\bar{g}_1 \wedge \bar{g}_2, \bar{g}_1 \wedge \bar{g}_3, \bar{g}_2 \wedge \bar{g}_3).$$

Для определения степени схожести сторон и углов двух элементарных ячеек Браве были введены следующие нормированные меры (принимают максимальное значение, равное 1, когда сравниваемые параметры полностью совпадают):

Мера схожести сторон:

$$\|\bar{l}_1 - \bar{l}_2\| = 1 - \frac{|\bar{l}_1 - \bar{l}_2|}{\max\{|\bar{l}_1|, |\bar{l}_2|\}}. \quad (1)$$

Мера схожести углов:

$$\|\bar{\alpha}_1 - \bar{\alpha}_2\| = 1 - \max \left\{ \begin{array}{l} \sin(|\alpha_{11} - \alpha_{21}|), \\ \sin(|\alpha_{12} - \alpha_{22}|), \\ \sin(|\alpha_{13} - \alpha_{23}|). \end{array} \right\}. \quad (2)$$

### Метод идентификации решёток на основе сравнения объёмов ячеек Вигнера–Зейтца

Исходными данными метода идентификации являются число вбрасываемых точек  $L$  и массив радиус-векторов узлов:

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

Для нахождения объёма ячейки Вигнера–Зейтца был разработан следующий алгоритм, основанный на методе Монте-Карло:

1. Центрируем всю решётку.
2. Определяем нормали от центрального узла к плоскостям, ограничивающим ячейку Вигнера–Зейтца.
3. Вычисляем объём ячейки, ограниченной плоскостями. Для этого используем метод Монте-Карло.

3.1. Производим  $L$  испытаний, в результате которых получаем  $L$  возможных значений трёхмерного случайного вектора, равномерно распределённого в объёме решётки.

3.2. Подсчитываем количество точек, попавших внутрь области, ограниченной плоскостями, и вычисляем объём ячейки, исходя из того, что вероятность попадания точки в область ячейки Вигнера–Зейтца пропорциональна её мере (объёму).

Для определения степени схожести объёмов двух ячеек Вигнера–Зейтца была введена следующая нормированная мера (принимает максимальное значение, равное 1, когда объёмы ячеек Вигнера–Зейтца у сравниваемых решёток полностью совпадают):

$$\|V_1 - V_2\| = 1 - \frac{\sqrt{(V_1 - V_2)^2}}{\max\{V_1, V_2\}}. \quad (3)$$

Для анализа эффективности введённых мер схожести был проведён ряд вы-

числительных экспериментов по идентификации кристаллических решёток.

### Результаты экспериментальных исследований

Исходными данными для экспериментов были 1400 решёток (по 200 решёток каждой из систем, представленных в табл. 1), полученных методом имитационного моделирования. Длины сторон и величины углов определялись значениями равномерно распределённой случайной величины.

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%.

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 (1). Во втором эксперименте сравнение двух решёток велось только по значению меры схожести углов (2). Результаты экспериментов представлены в табл. 2 и 3.

Таблица 2. Вероятность точной идентификации решёток основных систем решёток Браве 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

Таблица 3. Вероятность точной идентификации решёток основных систем решёток Браве 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

Данные в таблицах показывают, какой в среднем процент из всех *сравниваемых ячеек* (тип указан в левой части таблицы) имеет схожесть более 95 % с выбранной *эталонной ячейкой* (тип указан в верхней 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, для первого эксперимента множество решёток, совпавших с одной из триклинных, 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. 2 из всего множества систем решёток Браве действительно можно выделить три следующие обособленные группы: (триклинная, моноклинная, ромбическая), (кубическая, тригональная) и (тетрагональная, гексагональ-

ная). Полученный результат объясняется тем, что длины сторон элементарных ячеек Браве в каждой из выделенных групп связаны общим соотношением.

По данным табл. 3 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.

В результате для более точного определения типа решётки с использованием методов идентификации возникает необходимость одновременного применения обеих мер схожести. Для этого был проведён третий эксперимент, в котором две решётки считались похожими, если значения мер схожести сторон и углов были не меньше 0,95. Его результаты представлены в табл. 4.

Таблица 4. Вероятность точной идентификации решёток основных систем решёток Браве при сравнении сторон и 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>	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>tP</i>	0	3	33	48	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

Для кубических решёток было получено максимальное увеличение точности определения: с 32–38% до 75% (т.е. в два раза). Однако и в этом случае сохраняется обособленная группа (ромбическая, тетрагональная, кубическая), которая значительно затрудняет определение типа ре-

шётки при использовании какого бы то ни было классификатора.

На основании данных табл. 2, 3 и 4 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.

Последним шагом для увеличения точности идентификации решёток стало применение третьей меры схожести – схожести объёмов ячеек Вигнера–Зейтца.

Для начала было определено минимальное количество вбрасываемых точек, позволяющее вычислить объём ячейки Вигнера–Зейтца с достаточной точностью.

В четвёртом эксперименте вычислялась зависимость изменения меры схожести объёмов (3) от количества вброшенных точек. Исследование проводилось на случайно сгенерированной решётке. За эталонное значение объёма было принято значение, полученное в результате вбрасывания 1 000 000 точек. Результаты эксперимента представлены на рис. 3.



Рис. 3. Зависимость точности определения объёма ячейки Вигнера-Зейтца от количества вбрасываемых точек

Таблица 5. Вероятность точной идентификации решёток основных систем решёток Браве при сравнении сторон, углов и объёмов

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>	99	1	0	0	0	0	0
<i>mP</i>	0	96	2	1	0	0	1
<i>oP</i>	0	1	68	26	5	0	0
<i>tP</i>	0	2	29	54	15	0	0
<i>cP</i>	0	0	5	15	78	2	0
<i>hR</i>	0	0	0	1	2	97	0
<i>hP</i>	0	1	0	0	0	0	99

Точность определения объёма ячейки Вигнера–Зейтца почти перестаёт изменяться (составляя более 99 %) при вбрасывании более 40 000 точек. Дальнейшие

эксперименты было решено проводить, осуществляя вбрасывание 40 000 точек.

Равенство объёмов, выбранное в качестве меры схожести, не является доста-

точным условием равенства ячеек Вигнера–Зейтца. Поэтому очевидно, что сравнение решёток с использованием только метода идентификации на основании объёмов ячеек Вигнера–Зейтца не позволит точно определить тип решётки.

В заключительном, пятом, эксперименте сравнение двух решёток велось одновременно по значениям всех трёх мер схожести: сторон и углов элементарных ячеек Браве и объёмов ячеек Вигнера–Зейтца. Результаты эксперимента представлены в табл. 5.

По данным табл. 4 и 5, можно сделать вывод, что точность определения типа решётки возросла в среднем на 5 %. Максимальное увеличение точности было достигнуто для моноклинных решёток – 10 %.

Однако обособленная группа (ромбическая, тетрагональная, кубическая) всё равно сохранилась, а значит, задача разграничения этих трёх типов решёток Браве остаётся открытой.

### Заключение

Основным результатом одновременного использования всех трёх мер схожести стало преодоление рубежа в 95 % точ-

ности идентификации сразу для четырёх типов решёток (триклинных, моноклинных, тригональных и гексагональных).

На основании проведённого исследования можно сделать следующий вывод: для сгенерированного набора из 1400 решёток одновременное применение всех трёх описанных мер схожести является наилучшим способом идентификации кристаллической решётки.

Точность определения оставшихся трёх типов решёток (ромбических, тетрагональных и кубических) всё ещё не достаточно высока. Поэтому для них необходимо проведение дальнейших исследований с целью выявления дополнительных мер схожести (например, сравнение изоповерхностей, тензорного представления элементарной ячейки и т.п.).

Работа выполнялась при поддержке грантов РФФИ: 12-01-00237-а, 14-01-00369-а, 14-07-97040-р\_поволжье\_a, 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.

### Библиографический список

1. Куприянов А.В. Анализ текстур и определение типа кристаллической решётки на наномасштабных изображениях // Компьютерная оптика. 2011. Т. 35, № 2. С. 157-157.

2. Tilley R.J.D. Crystals and crystal structures. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2006. P. 17-32.

3. Куприянов А.В. Оценка меры схожести кристаллических решёток по координатам их узлов в трёхмерном пространстве // Компьютерная оптика. 2012. Т. 36, № 4. С. 590-595.

### Информация об авторе

**Кириш Дмитрий Викторович**, магистрант, Самарский государственный аэрокосмический университет имени академика С.П. Королёва (национальный исследовательский университет). E-mail: [limitk@mail.ru](mailto:limitk@mail.ru). Область научных интере-

сов: цифровая обработка изображений, способы математического описания и идентификации кристаллических решёток, классификация кристаллических решёток.

## CRYSTAL LATTICE IDENTIFICATION ON THE BASIS OF ASSESSING UNIT CELL PARAMETERS

© 2014 D. V. Kirsh

Samara State Aerospace University, Russian Federation

The paper is devoted to the problem of crystal lattice identification in three-dimensional space. Two identification methods based on assessing the parameters of unit cells have been developed to solve this problem. The first method is based on the calculation and comparison of the six basic cell parameters: the three lengths of the cell sides and the three magnitudes of angles between the sides. The second method is based on the calculation and comparison of Wigner-Seitz cell volumes using the Monte-Carlo method. Both methods include normalized similarity measures for the parameters calculated: the edge similarity and the angle similarity measure for Bravais unit cells and the volume similarity measure for Wigner-Seitz cells. A number of computational experiments for crystal lattice identification were carried out using these methods. In the course of the experiments, first, the dependence of the accuracy of defining the volume of a Wigner-Seitz cell on the number of the points included and, second, the probability of accurate Bravais lattice identification when comparing different sets of the parameters assessed have been specified. As a result of the experiments carried out, the accuracy of identification for four systems of Bravais lattices exceeded 95 per cent.

*Basic parameters of a unit cell, estimation of Wigner-Seitz cell volume, Monte-Carlo method, similarity measure.*

### References

1. Kupriyanov A.V. Texture analysis and identification of the crystal lattice type on nanoscale images // *Computer Optics*. 2011. V. 35, no.2. P. 151-157. (In Russ.)
2. Tilley R.J.D. Crystals and crystal structures. Chichester: John Wiley & Sons Ltd, 2006. P. 17-32.
3. Kupriyanov A.V. Estimating the similarity measure of crystal lattices by coordinates of their nodes in three dimensional space // *Computer Optics*. 2012. V. 36, no.4. P. 590-595. (In Russ.)

### About the author

**Kirsh Dmitriy Victorovich**, student in the Master's programme, Samara State Aerospace University, Russian Federation. E-mail: [limitk@mail.ru](mailto:limitk@mail.ru). Area of Research: digital image processing, methods of mathematical formulation and comparison of crystal lattices, classification of crystal lattices.