УДК 538.91

© 2021 г. Д.В. Фомин,

Е.В. Дегтярев

(Амурский государственный университет, Благовещенск)

СТРУКТУРНЫЙ КОМПАКТНО-МАТРИЧНЫЙ МЕТОД РАСЧЕТА КОЭФФИЦИЕНТА КОМПАКТНОСТИ

Метод компактного матричного описания регулярных трехмерных пространственных конфигураций и разработанные на его основе численные методы расчета некоторых структурных и энергетических параметров кубических решеток показали себя более эффективными в сравнении с другими численными методами. Успешное применение метода компактного матричного описания к простейшей гексагональной решетке позволяет перейти к разработке более эффективных численных методов расчетов структурных и энергетических параметров решеток данного типа.

Ключевые слова: модель кристаллической решетки, гексагональный алмаз, гексагональная решетка, компактный матричный метод, структурный компактно-матричный метод, коэффициент компактности, плотность пространственной упаковки.

DOI: 10.22250/isu.2021.69.25-38

Введение

Задачи описания и упаковки различных пространственных структур представляют большой теоретический и практический интерес в различных областях современной науки и техники. Решение подобных задач позволяет оптимальным образом использовать пространства контейнеров для хранения и транспортировки грузов, особенно в условиях жестких ограничений, характерных для аэрокосмической сферы, а также для любых длительных автономных передвижений. Также задачи описания и упаковки пространственных структур находят применение в физике конденсированного состояния и в физике плазмы [1 – 14].

Для пространственных структур кубической сингонии были разработаны эффективные математические модели и численные методы расчета ряда структурных и энергетических параметров [15 – 17], в частности, метод компактного матричного описания и основанные на построенных с его помощью математических моделях численных методов расчета коэффициента плотности пространственной упаковки и постоянной Маделунга. Однако для веществ с не кубической структурой новые методы неприменимы [18].

С другой стороны, проведенные исследования на примере кристаллической решетки гексагонального алмаза (структурный тип вюрцит) показали наличие кубического периода и куба-генератора – фрагмента структуры кубической формы, обладающего главным свойством элементарной ячейки: возможностью восстановить сколь угодно большой кристалл путем трансляции данного фрагмента. Что в свою очередь позволяет, во-первых, предположить возможное наличие таких фрагментов в кристаллических решетках других структурных типов и сингоний; во-вторых, перейти к разработке эффективного численного метода расчета коэффициента компактности исследуемой структуры [18 – 20]. В работе [21] приведены описание структурного компактно-матричного метода и экспериментальная оценка его эффективности. При этом, на взгляд авторов настоящей статьи, суть разработанного численного метода не была раскрыта в должной степени.

Анализ компактного матричного описания

Как отмечалось в работах [15 – 18], компактное матричное описание пространственной структуры представляет собой набор треугольных матриц, получаемых путем пошагового «сжатия» трехмерного матричного описания кубического фрагмента, характеризующего всю структуру, на основе свойств симметрии куба и квадрата. Поскольку пространственная структура по определению полностью описывается кубом-генератором, то набором матриц координационных слоев, охватывающих куб-генератор, можно также описать кристаллическую структуру целиком. Последовательность кубических координационных слоев, полностью охватывающих пространство куба-генератора, принято называть набором базовых координационных слоев.

Как уже отмечалось в работе [18], при построении координационных слоев, описывающих пространство, большее заключенного в куб-генератор, оказывается, что эти координационные слои состоят из фрагментов координационных слоев базового набора. Выполнив построение достаточно большой последовательности этих слоев, легко заметить, что, во-первых, схемы координационных слоев периодически повторяются (рис. 1), а во-вторых,

слои, занимающие одинаковые позиции в разных периодах, различаются только количеством вертикальных и горизонтальных «полос». На рис. 2 показаны схемы координационных слоев № 6, 12, 18, принадлежащих к первому, второму и третьему «периодам» соответственно и занимающих позицию № 2 в своих периодах (здесь и далее иллюстрации приведены для базового набора из четырех слоев).

Рис. 1. Схемы слоев под номерами с 16 по 21 и их позиции в периоде.

Рис. 2. Повторяющиеся вертикальные и горизонтальные «полосы», наблюдаемые в координационных слоях под номерами 6, 12, 18.

Периодом модели будем называть последовательность координационных слоев с номерами от L_{min} до L_{max} , рассчитываемыми по формулам:

$$L_{min} = (N + 1) + 2Nk = N(1 + 2k),$$

$$L_{max} = (N + 1) + 2N(k + 1) - 1 = N(3 + 2k),$$

где L_{min} , L_{max} – соответственно минимальный и максимальный номер слоя, входящего в период; k – произвольное целое число большее нуля, задающее номер периода; N – максимальный номер координационного слоя базового набора.

Достаточно очевидно, что наличие такой периодичности позволяет заменить обращение к матрицам слоев, относящихся к произвольному периоду, обращением к соответствующим матрицам первого периода. А также (если в контексте решения конкретной задачи, это более удобно) формировать матрицу нужного слоя путем добавления повторяющихся «полос» в соответствующую ему матрицу первого периода. В свою очередь не вызывает

сомнения, что рассмотренные на примере компактных матриц первого этапа сжатия взаимодействие координационных слоев и их периодичность непосредственно определяют общую структуру компактных матриц независимо от того, к какому этапу сжатия они относятся. Таким образом, набор компактных матриц, описывающих куб-генератор, может быть использован для описания произвольного координационного слоя и, соответственно, сколь угодно большого фрагмента решетки.

Численный метод подсчета количества частиц

На основании результатов проведенного анализа свойств компактного матричного описания можно заключить, что, если некоторая пространственная структура описывается конечным набором компактных матриц, полученным на первом шаге сжатия, то, очевидно, описанная закономерность позволяет заменить обращение к матрице каждого исследуемого координационного слоя обращением к соответствующей ему матрице первого периода. При этом потребуются всего лишь кратно учитывать результаты обработки отдельных компонентов матрицы первого периода. Однако этот подход можно значительно улучшить.

Пусть фрагмент структуры, в котором нужно подсчитать количество частиц, имеет кубическую форму и задан максимальным номером координационного слоя, находящегося в пространстве этого фрагмента. Тогда для каждой матрицы первого периода можно определить количество ее образов – координационных слоев с подобной структурой, входящих в описание исследуемого фрагмента. Под образом некоторой текущей матрицы будем понимать матрицу, находящуюся на том же месте, что и исходная, но в любом из последующих периодов. Таким образом, номера координационных слоев и образуемых ими периодов можно отобразить на числовой прямой (рис. 3).

Рис. 3. Отображение последовательности периодов, координационных слоев и их позиций в составе периодов на числовой прямой.

Тогда определить номер периода, которому принадлежит заданный координационный слой L , номер слоя в периоде, а также количество образов слоя можно по формулам:

$$\begin{aligned}
T &= [(l - (n + 1))div(2N)] + 1; \\
L_{pro} &= (L - (N + 1) mod(2N)); \\
C &= [(L_{max} - (N + 1 + L_p)div(2N)] + 1,
\end{aligned} \tag{1}$$

где T – номер периода, которому принадлежит слой L ; N – наибольший номер координационного слоя, входящего в состав базового набора; L_p – номер позиции слоя L внутри периода; C – количество образов слоя L_p ; L_{max} – наибольший номер координационного слоя, описывающий исследуемый фрагмент структуры.

При этом компактную матрицу первого шага сжатия можно разбить на структурные компоненты (рис. 4).

Рис. 4. Схема разбиения на компоненты компактных матриц первого шага сжатия.
Слева – матрица слоя №10. Справа – матрица слоя №4.

Границы этих компонентов легко определяются на основе количества матриц, составляющих базовый набор, и номера текущего координационного слоя. Например, угловой компонент № 0 представляет собой квадрат с длиной стороны L' , равной разности номера текущего координационного слоя L_{PA} и номера наибольшего слоя N , входящего в базовый набор. Компонент №4 представляет собой прямоугольник, одна сторона которого совпадает со стороной квадрата компонента №0, а другая рассчитывается следующим образом:

$$W = 2(L_{PA} - L') - 1.$$

Принимая во внимание принцип формирования координационных слоев, выявленную периодичность, а также анализируя схемы матриц координационных слоев, находящихся в отношениях прообраза и образов, легко заметить, что образы будут иметь те же компоненты, что и прообраз, но в количестве, зависящем от номера периода, к которому они относятся (рис. 5).

Рис. 5. Схемы компактных матриц первого шага сжатия слоев под номерами 4, 10, 16 (слева направо).

Так схема компактной матрицы слоя № 10, находящегося в первой позиции второго периода, содержит такое же количество угловых элементов, что и матрица слоя № 4, находящегося в первой позиции первого периода. Сведения о количестве структурных компонентов в зависимости от их типа и номера периода, которому принадлежит конкретный координационный слой, для периодов № 1 – 3 приведены в табл. 1.

Таблица 1

Период	Углы (компоненты № 0–3)	Ребра (компоненты № 4–7)	Центр (компонент № 8)
1	1	1	1
2	1	3	9
3	1	5	25

Легко заметить, что количество структурных компонентов определенного типа напрямую зависит от номера периода. Так, количество угловых компонентов всегда равно единице, количество реберных и центральных компонентов может быть рассчитано по формулам:

$$\alpha_T = 1 + 2(T - 1), \quad \beta_T = (\alpha_T)^2,$$

где α_T – количество реберных компонентов; β_T – количество центральных компонентов в структуре матрицы рассматриваемого типа периода T .

Зная количество образов данной матрицы и количества частиц по каждой группе ее компонентов, можно определить количество частиц в любой матрице-образе. Достаточно просто по группам найти сумму произведений количества частиц на количество компонентов в целевой матрице-образе.

Однако можно заметить, что количества компонентов каждого типа в структуре матриц-образов, находящихся в разных периодах, образуют простые числовые ряды. Применяя подходы комбинаторики, можно не определять количество частиц в каждой компактной матрице, описывающей исследуемый фрагмент кристаллической структуры, а сразу же определять сум-

марное количество частиц во всех матрицах-образах для каждой матрицы первого периода. Для этого достаточно найти частичную сумму соответствующего ряда – суммарное количество компонентов данного типа во всех матрицах-образах прообраза, описывающих исследуемый кристалл. Следовательно, количество компонентов может быть рассчитано по следующим формулам:

$$C_{angle} = \sum_{T=1}^n 1 = n; \quad C_{edge} = \sum_{T=1}^n (1 + 2(T-1)) = n^2; \quad (2)$$

$$C_{center} = \sum_{T=1}^n (1 + 2(T-1))^2 = \frac{4n^3 - n}{3},$$

где C_{angle} – суммарное количество угловых компонентов во всех исследуемых матрицах-образах; C_{edge} – суммарное количество реберных компонентов; C_{center} – суммарное количество центральных компонентов; n – количество матриц-образов данного прообраза в исследуемом фрагменте кристалла.

Следовательно, подсчет количества частиц в заданном фрагменте решетки можно реализовать в два этапа. На первом выполнить прямой подсчет количества частиц в матрицах базового набора. На втором для каждой компактной матрицы первого периода первого шага сжатия выполнить подсчет количества частиц в компонентах каждого типа, затем, используя формулы (1) и (2), определить общее количество частиц в ее образах. Сумма полученных результатов и есть искомое количество частиц в исследуемом фрагменте кристалла. Аналогичные рассуждения применимы для компактных матриц второго и третьего шагов сжатия. Схема разбиения матриц третьего шага на структурные компоненты показана на рис. 6.

Рис. 6. Схема разбиения матрицы третьего шага сжатия на базовые структурные компоненты.

Границы компонентов легко определяются на основе количества матриц, составляющих базовый набор, и номера текущего координационного

слоя. Например, угловой компонент № 0 представляет собой квадрат с длиной стороны L'' , равной номеру N наибольшего слоя, входящего в базовый набор. А компонент № 3 представляет собой прямоугольник, одна сторона которого совпадает со стороной квадрата компонента № 0, а другая рассчитывается идентично соответствующей стороне компонента № 4 из разбиения компактной матрицы второго шага сжатия.

Матрицы третьего шага сжатия для слоев № 16 и 22 показаны на рис. 7.

Рис. 7. Схемы компактных матриц третьего шага сжатия слоев под номерами 16 и 20 (слева направо).

В табл. 2 представлена информация о количестве элементов каждого типа в структуре матрицы в зависимости от номера периода. При этом для удобства расчетов нумерация периодов начинается с третьего периода.

Таблица 2

Период	Углы (компоненты № 0-3)	Ребра (компоненты № 4-7)	Центр (компонент № 8)
1	1	2	1
2	1	3	3
3	1	4	6

Следует отметить, что количество центральных компонентов при рассмотрении треугольных компактных матриц уже само по себе изменяется как сумма ряда от периода к периоду. При этом формулы для расчета количества структурных компонентов каждого типа имеют вид:

$$\begin{aligned}
 \alpha_T &= T + 1, \quad \beta_T = \sum_{j=1}^T j = \frac{T^2 + T}{2}; \\
 C_{angle} &= \sum_{T=1}^n 1 = n; \\
 C_{edge} &= \sum_{T=1}^n (T + 1) = \frac{n^2 + n}{2} + n; \\
 C_{center} &= \sum_{T=1}^n \sum_{j=1}^T j = \frac{n(n+1)(n+2)}{6}.
 \end{aligned} \tag{3}$$

Важной особенностью компактных матриц второго и третьего шага

сжатия является необходимость использовать в качестве преобразов матрицы второго и третьего периодов соответственно. Причина этого – отсутствие компонентов, встречающихся в структуре матриц старших периодов, в матрицах периодов с меньшим номером.

Таким образом, разработанный численный метод позволяет точно рассчитывать количество частиц в заданном объеме кристалла. Благодаря тому, что расчет выполняется исключительно по нескольким первым периодам и базовому набору матриц, размер кристалла перестает влиять на время и объем памяти, необходимые для вычислений. При номере максимального исследуемого координационного слоя $L_{max} > 108$, для расчета по матрицам первого шага сжатия, $L_{max} > 180$ для расчета по матрицам второго шага сжатия, $L_{max} > 252$ – для третьего шага сжатия.

Следует отметить: поскольку для получения достаточно точных результатов численные методы должны применяться к очень большому количеству частиц, то достигнутое сокращение объемов вычислений является значительным.

Алгоритм расчета коэффициента компактности

Расчет коэффициента компактности гексагональной решетки, относящейся к структурному типу вюрцит, можно выполнить, применив канонический подход к некоторому достаточно большому фрагменту кристалла. Тогда задача расчета коэффициента компактности сведется к подсчету количества сфер и их частей, принадлежащих пространству исследуемого фрагмента кристаллической структуры. При этом следует проанализировать изменение результатов в зависимости от исследуемого объема.

Реализовать канонический подход можно на основе разработанных авторских версий компактного матричного описания кристаллической структуры простейшей гексагональной решетки и численного метода подсчета количества частиц в заданном количестве координационных слоев. А чтобы проследить изменение значения коэффициента компактности в зависимости от размера фрагмента кристалла, нужно циклически увеличивать номер старшего координационного слоя, включаемого в исследование. Канонический подход подразумевает учет только «эффективного» объема сфер, т.е. только того объема, который находится внутри заданного фрагмента кристалла [9 – 11, 16, 17].

В случае применения классического подхода к элементарной ячейке рассчитать эффективный объем частиц не составляет труда. Но в случае применения разработанного численного метода подсчета количества частиц

оказывается, что разработанный метод подсчета количества частиц в заданном фрагменте кристаллической структуры не учитывает, принадлежит ли частица внутреннему пространству кристалла или же его поверхности.

Поэтому при расчете коэффициента компактности компактно-матричным методом приходится дополнительно рассчитывать количество частиц, принадлежащих поверхности кристалла с учетом их позиции, и использовать в качестве поправки. Данная поправка будет рассчитываться следующим образом:

$$P = \frac{7}{8} N_{verts} + \frac{3}{4} N_{edges} + \frac{1}{2} N_{faces},$$

где P – количество сфер, которые должны быть исключены из общего количества частиц в исследуемом объеме кристалла; N_{verts} , N_{edges} , N_{faces} – количество частиц, находящихся в вершинах, на ребрах и на гранях старшего координационного слоя соответственно.

Само же количество частиц каждого типа легко определить из матрицы старшего координационного слоя или из ее прообраза, учитывая способ их формирования и используя тот же прием, что и при подсчете количества частиц в заданном количестве координационных слоев.

К примеру, матрица третьего шага сжатия содержит количество частиц, находящихся в вершинах соответствующего координационного слоя, в сегменте № 0, на ребрах – в сегменте № 1, на гранях – в сегменте № 2 (рис. 8).

Рис. 8. Разделение матрицы третьего шага сжатия на сегменты.

Соотнося способы выделения компонентов и сегментов матрицы третьего шага сжатия (рис. 6 – 8), можно заметить, что расчет количества частиц для заданного старшего координационного выполняется на основе матриц третьего периода, взятых в качестве прообразов. Следовательно, подсчет частиц каждого типа может быть выполнен определением их количества во

фрагментах компонентов матрицы, принадлежащих соответствующему сегменту.

Например, количество частиц, находящихся в вершинах координационного слоя, определяется единственным элементом компактной матрицы, составляющим сегмент № 0. Данный сегмент содержит только фрагмент компонента структуры матрицы № 1. Учитывая периодичность структуры, количество частиц в этом элементе матрицы и будет количеством частиц в вершинах куба-генератора.

Количество частиц, находящихся на ребрах координационного слоя определяется сегментом № 1 компактной матрицы. Данный сегмент содержит фрагменты компонентов структуры матрицы № 1, 2 и 5 (см. рис. 6). Количество частиц N_{edges} в этом сегменте матрицы будет рассчитываться как сумма количеств частиц в соответствующих фрагментах компонентов № 1, №2 и произведения количества частиц в соответствующем фрагменте одного компонента №5 на номер периода старшего координационного слоя, увеличенный на единицу:

$$N_{edges} = (C_{1,1} + C_{1,2}) + C_{1,5}(T + 1),$$

где T – период, к которому принадлежит старший координационный слой; $C_{1,1}$, $C_{1,2}$, $C_{1,5}$ – количества элементов во фрагментах компонентов №1, 2, а также одного компонента № 5, входящих в состав сегмента №1.

Количество частиц N_{faces} , находящихся на гранях координационного слоя, определяется сегментом №2 компактной матрицы. Данный сегмент содержит фрагменты компонентов №0–6 структуры матрицы. Учитывая периодичность структуры, количество частиц в этом сегменте матрицы может быть рассчитано следующим образом:

$$N_{faces} = (C_{2,0} + C_{2,1} + C_{2,2}) + (C_{2,3} + C_{2,4} + C_{2,5})(T + 1) + C_{2,6} \frac{T(T + 1)}{2},$$

где $C_{2,0}...C_{2,6}$ – количество элементов во фрагментах компонентов №0, 1, 2, а также во фрагментах компонентов №5 и 6, входящих в состав сегмента №2 и взятых по одному экземпляру.

Таким образом, разработан способ расчета коэффициента компактности простейшей решетки гексагональной сингонии, реализованный на основе метода компактного матричного описания и численного метода подсчета количества частиц в заданном объеме кристаллической структуры. Такой расчет имеет низкую вычислительную сложность, позволяет учитывать в исследовании более десяти тысяч координационных слоев. При этом объем вычислений мало зависит от количества исследуемых слоев. Более того, структурный компактно-матричный численный метод предполагает выпол-

нение расчетов в целых числах, что также снижает вычислительную сложность и погрешность, связанную с особенностями дробных чисел в памяти компьютера.

Заключение

Задачи описания и упаковки различных пространственных структур представляют большой теоретический и практический интерес в различных областях современной науки и техники. Например, – в физике плазмы определенный интерес состоит в исследовании кристаллов пылевой плазмы, структуры которых соответствуют типовым кристаллическим решеткам твердых тел.

Выявление куба-генератора показало возможность применения к простейшей гексагональной кристаллической решетке метода компактного матричного описания. Что, привело впоследствии к созданию компактной матричной модели исследуемой пространственной решетки. В свою очередь это позволило разработать структурный компактно-матричный численный метод определения количества частиц исследуемой структуры в заданном объеме и расчета коэффициента компактности.

Данный численный метод имеет сравнительно низкую вычислительную сложность, при этом объем вычислений мало зависит от количества исследуемых слоев. Более того, структурный компактно-матричный численный метод предполагает выполнение расчетов в целых числах, что дополнительно снижает вычислительную сложность и погрешность, связанную с особенностями представления дробных чисел в памяти компьютера.

Важно подчеркнуть еще одно свойство структурного компактно-матричного численного метода – его универсальность. Данный метод применим для выполнения соответствующих расчетов в отношении любых пространственных структур, для которых, во-первых, возможно описание компактным матричным методом и, во-вторых, представление в виде пространственной упаковки равновеликих сфер.

По мнению авторов представленной работы, применение структурного компактно-матричного численного метода в отношении структур, для которых не выполняется второе условие, также возможно. Но в данном случае потребуется некоторая адаптация численного метода и метода компактного матричного описания, позволяющая учитывать различие в свойствах частиц многоэлементной пространственной структуры.

ЛИТЕРАТУРА

1. *Бондарева Т.П.* Компьютерное моделирование структуры случайной упаковки систем сферических частиц // Научные ведомости Белгородского государственного университета. Серия «Экономика. Информатика». – 2013. – № 1(144). – С. 78-85.
2. *Бондарев В.Г., Мигаль Л.В., Бондарева Т.П.* Имитационное моделирование структуры плотноупакованных систем твердых дисков // Научные ведомости Белгородского государственного университета. – 2008. – № 9(49). – С. 248-260.
3. *Дик И.Г., Дьяченко Е.Н., Миньков Л.Л.* Моделирование случайной упаковки шаров // Физическая мезомеханика. – 2006. – № 4(9). – С. 63-69.
4. *Верхотуров М.А., Верхотурова Г.Н., Данилов К.В., Ягудин Р.Р.* Упаковка сложных трехмерных объектов в прямоугольный контейнер на базе дискретно-логического представления информации // Известия Самарского научного центра РАН. – 2014. – № 4-2. – С. 378-383.
5. *Чеканин В.А., Чеканин А.В.* Прикладное программное обеспечение для решения задач ортогональной упаковки объектов // Объектные системы. – 2016. – № 13. – С. 10-15.
6. *Урусов В.С.* Компьютер помогает предвидеть структуру и свойства кристаллов // Вестник РАН. – 1997. – Т. 67, № 2. – С. 113-117.
7. *Sabry A., Ayad, M., Chowik A.* Computational Materials Science, 2000. – P. 345.
8. *Зуев В.В., Поцелуева Л.Н., Гончаров Ю.Д.* Кристаллоэнергетика как основа оценки свойств твердотельных материалов. – СПб., 2006.
9. *Шаскольская М.П.* Очерки о свойствах кристаллов. – М.: Наука, 1978.
10. *Шаскольская М.П.* Кристаллография. – М.: Высшая школа, 1984.
11. *Васильев Д.М.* Физическая кристаллография. – М.: Металлургия, 1972.
12. *Эйхвальд А.И., Карасев В.Ю., Дзлиева Е.С., Иванов А.Ю.* Упорядоченные плазменно-пылевые структуры в стратах тлеющего разряда // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета. – 2008. – № 1. – С. 36-47.
13. *Карасев В.Ю., Эйхвальд А.И., Дзлиева Е.С., Иванов А.Ю.* Об упорядоченных пылевых структурах, формируемых в тлеющем разряде // ЖЭТФ. – 2008. – Т. 133, В. 2. – С. 460–465.
14. *Дзлиева Е.С. и др.* Об особенностях объемного строения плазменно-пылевых структур // Вестник Санкт-Петербургского государственного университета. – 2013. – № 2. – С. 39-45.
15. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Модифицированный алгоритм расчета постоянной Маделунга // Информатика и системы управления. – 2010. – № 3(25). – С. 27-34.
16. *Еремин И.Е., Сычев М.С.* Моделирование постоянной Маделунга кристаллов кубической сингонии. I // Вестник Тихоокеанского государственного университета. – 2012. – № 1(24). – С. 43-50.
17. *Еремин И.Е., Еремينا В.В., Сычев М.С., Моисеенко В.Г.* Эффективные коэффициенты компактности двухкомпонентных кубических кристаллов // ДАН. – 2015. – Т. 461, № 6. – С. 650-652.
18. *Фомин Д.В.* Детерминированное моделирование кристаллической структуры гексагонального алмаза. II // Информатика и системы управления. – 2019. – № 3(61). – С. 32-41.
19. *Mindat.org: Lonsdaleite* [Электронный ресурс] // База данных по минералогии. Hudson Inst. Mineralogy. – <https://www.mindat.org/min-2431> (Дата обращения: 25.08.2020).

20. *Volume A: Space group symmetry* [Электронный ресурс] // International tables for crystallography. – <http://xtrp.iucr.org/As> (Дата обращения 25.08.2020).
21. *Еремин И.Е., Фомин Д.В.* Оценка эффективности структурного компактно-матричного метода расчета коэффициента компактности // Информатика и системы управления. – 2021. – № 1(67). – С. 44-54.

Статья представлена к публикации членом редколлегии И.Е. Ереминым.

E-mail:

Фомин Денис Васильевич – gefest-uni@yandex.ru;

Дегтярев Евгений Васильевич – aldan-94@mail.ru.