

МОСКОВСКИЙ ГОСУДАРСТВЕННЫЙ УНИВЕРСИТЕТ
имени М. В. ЛОМОНОСОВА

НАУЧНО-ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ ИНСТИТУТ
ЯДЕРНОЙ ФИЗИКИ имени Д. В. СКОБЕЛЬЦЫНА

В. К. ДОЛИНОВ

ЛИНЕЙНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ
РЕШЕТКИ

Москва, 2010 г.

УДК 531.1(075.8)
ББК 22.21я73
Д64

Долинов В. К.

Д64 Линейные преобразования кристаллической решетки : учебное пособие / В. К. Долинов. — М. : Университетская книга, 2010. — 16 с. : табл., ил.

ISBN 978-5-91304-142-5

Учебное пособие содержит описание алгоритмов некоторых линейных преобразований (трехмерные повороты, растяжение вдоль заданного направления, ортогональное проектирование на заданную плоскость) кристаллической решетки, а также интерактивной компьютерной программы, предназначенной для вычисления и графического представления решетки, подвергнутой тому или другому линейному преобразованию.

Пособие предназначено для студентов и аспирантов физических факультетов.

УДК 531.1(075.8)
ББК 22.21я73

Учебное издание

Владислав Константинович Долинов

**ЛИНЕЙНЫЕ ПРЕОБРАЗОВАНИЯ
КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ**

Учебное пособие

Подп. в печать 15.10.2010. Формат 60×84¹/₁₆. Бумага офсетная.
Печать цифровая. Тираж 50 экз. Заказ № Т-215.

Отпечатано с диапозитивов, предоставленных автором, в типографии «КДУ».
Тел./факс (495) 939-44-91; www.kdu.ru; e-mail: press@kdu.ru

© МГУ, 2010.

© НИИЯФ МГУ, 2010.

© В. К. Долинов, 2010.

© Издательство КДУ, обложка, 2010.

ISBN 978-5-91304-142-5

1 Введение

Исследование взаимодействий различных частиц с кристаллами позволяет получать уникальную информацию как о характере взаимодействия, так и о структуре вещества. Хорошо известны результаты таких исследований в рамках рентгено-, электроно- и нейтроноструктурного анализа.

В последние десятилетия получили развитие методы, основанные на использовании каналирования заряженных частиц и эффекта теней [1]. При каналировании ионов в монокристалле может происходить их резонансное когерентное возбуждение за счет того, что частота какой-либо Фурье-компоненты периодического поля кристалла совпадает с энергией возбуждения некоторого связанного состояния иона (эффект Огорокова). В эффекте теней происходит блокировка определенных направлений вылета частиц, рассеянных узлом решетки.

Во всех этих и других подобных явлениях существенную роль играет пространственная структура кристалла. При физической интерпретации некоторых характеристик процессов взаимодействия пучков частиц с монокристаллами возникает необходимость в наглядном представлении пространственного расположения узлов кристаллической решетки как оно видится с того или другого направления \vec{N} . Проекция решетки на плоскость $\Pi_{\vec{N}}$, перпендикулярную \vec{N} , в ряде случаев дает именно то, что надо.

При теоретическом описании эффекта Огорокова оказывается удобным рассматривать процесс возбуждения релятивистского иона в системе его покоя [2, 3]. В этой системе отсчета кристаллическая решетка за счет преобразования Лоренца с фактором γ_L оказывается "сплющенной" в γ_L раз в направлении скорости $\vec{\beta}_c$ иона относительно лабораторной системы.

Все упомянутые выше преобразования решетки (поворот, совмещающий полярную ось системы с направлением наблюдения \vec{N} ; проектирование на плоскость $\Pi_{\vec{N}}$; однородная деформация в направлении $\vec{\beta}_c$) являются *линейными*. Поэтому они могут быть описаны линейными операторами или соответствующими матрицами [4] в 3-мерном евклидовом пространстве.

Данное учебное пособие содержит описание алгоритмов указанных линейных преобразований решетки и компьютерной программы для их реализации и визуализации.

2 Кристаллическая решетка

Множеству узлов кристаллической решетки соответствует множество векторов в 3-мерном евклидовом пространстве B_3 [5]

$$\vec{r}^{(j)}(m_1, m_2, m_3) = \vec{t}_{m_1 m_2 m_3} + \vec{P}^{(j)}, \quad (1)$$

где

$$\vec{t}_{m_1 m_2 m_3} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3, \quad \{m_k\}_{k=1}^3 \in Z \quad (\text{integer numbers}), \quad (2)$$

— вектор трансляции; $\{\vec{a}_k\}_{k=1}^3$ — основные периоды (элементарные трансляции) решетки; $\{\vec{P}^{(j)}\}_{j=1}^n$ — базис элементарной ячейки, т.е. совокупность n узлов элементарной ячейки:

$$\vec{P}^{(j)} = \alpha_1^{(j)} \vec{a}_1 + \alpha_2^{(j)} \vec{a}_2 + \alpha_3^{(j)} \vec{a}_3, \quad \alpha_k^{(j)} \in [0, 1], \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (3)$$

Здесь предполагается, что начало отсчета всех векторов находится в одном из узлов решетки, а базисные векторы $\{\vec{a}_k\}_{k=1}^3$ — произвольные три вектора, не лежащие в одной плоскости.

Декартову правую систему координат, определяемую линейно независимыми векторами $\vec{a}_1, \vec{a}_2, \vec{a}_3$, будем называть натуральной (Natural system), а все векторы относительно нее снабжать символом Nat. В качестве масштабных единиц длины по осям будем использовать a_1, a_2, a_3 . Эта система отсчета является, вообще говоря, *косугольной*, а масштабные единицы $a_k \neq 1$.

Согласно (3) координаты базисных узлов элементарной ячейки в Nat-системе имеют вид

$${}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(j)} = \{\alpha_1^{(j)}, \alpha_2^{(j)}, \alpha_3^{(j)}\} = \{\alpha_k^{(j)}\}_{k=1}^3. \quad (4)$$

Координаты произвольного узла $\vec{r}^{(j)}(m_1, m_2, m_3)$ в этой системе согласно (1 — 3) суть

$${}^{(\text{Nat})}\vec{r}^{(j)} = \{m_k + \alpha_k^{(j)}\}_{k=1}^3. \quad (5)$$

Для упрощения вычислительных процедур удобнее пользоваться *прямоугольной* декартовой системой координат с ортонормированным базисом $\{\vec{e}_k\}_{k=1}^3$. Построим его с помощью известного процесса ортогонализации [4] базиса $\{\vec{a}_k\}_{k=1}^3$:

$$\vec{e}_1 = \frac{\vec{a}_1}{\sqrt{(\vec{a}_1, \vec{a}_1)}}, \quad \vec{e}_2 = \frac{\vec{g}_2}{\sqrt{(\vec{g}_2, \vec{g}_2)}}, \quad \vec{e}_3 = \frac{\vec{g}_3}{\sqrt{(\vec{g}_3, \vec{g}_3)}}, \quad (6)$$

где

$$\vec{g}_2 = \vec{a}_2 - (\vec{a}_2, \vec{e}_1)\vec{e}_1, \quad \vec{g}_3 = \vec{a}_3 - (\vec{a}_3, \vec{e}_2)\vec{e}_2 - (\vec{a}_3, \vec{e}_1)\vec{e}_1, \quad (7)$$

(\vec{a}, \vec{b}) — скалярное произведение векторов \vec{a} и \vec{b} . Будем называть построенную прямоугольную правую систему координат системой решетки (Lattice system), а все величины относительно нее снабжать символом Lat.

Соотношения (6 – 7) являются линейными относительно базиса $\{\vec{a}_k\}_{k=1}^3$:

$$\vec{e}_k = \sum_{m=1}^3 \nu_{km} \vec{a}_m, \quad (8)$$

где ν_{km} — вещественные числа, определяемые скалярными произведениями базисных векторов $\{\vec{a}_k\}_{k=1}^3$ друг с другом. Решая систему линейных уравнений (8), находим обратные соотношения [4]

$$\vec{a}_k = \sum_{m=1}^3 \lambda_{km} \vec{e}_m, \quad (9)$$

где $\lambda_{km} = (\nu^{-1})_{km}$, ν^{-1} — матрица, обратная матрице ν .

Пусть $\vec{\rho}$ — произвольный вектор, заданный в Nat-системе своими координатами $\{\rho_k^{(\text{Nat})}\}_{k=1}^3$:

$$\vec{\rho} = \sum_k \rho_k^{(\text{Nat})} \vec{a}_k. \quad (10)$$

Подставляя сюда (9), получаем

$$\vec{\rho} = \sum_{km} \rho_k^{(\text{Nat})} \lambda_{km} \vec{e}_m. \quad (11)$$

Следовательно, координаты этого вектора в Lat-системе суть

$$\rho_m^{(\text{Lat})} = \sum_k \rho_k^{(\text{Nat})} \lambda_{km}. \quad (12)$$

Применяя это преобразование координат к вектору (3), получаем координаты базисных узлов элементарной ячейки в Lat-системе

$${}^{(\text{Lat})}P_m^{(j)} = \sum_{k=1}^3 \alpha_k^{(j)} \lambda_{km},$$

т.е.

$${}^{(\text{Lat})}\vec{P}^{(j)} = \{(\alpha_1^{(j)} \lambda_{1m} + \alpha_2^{(j)} \lambda_{2m} + \alpha_3^{(j)} \lambda_{3m})\}_{m=1}^3, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (13)$$

Для кубических решеток $\lambda_{km} = \delta_{km}$ и

$${}^{(\text{Lat})}\vec{P}^{(j)} = \{\alpha_1^{(j)}, \alpha_2^{(j)}, \alpha_3^{(j)}\}, \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (14)$$

Следовательно, в этом случае ${}^{(\text{Lat})}\vec{P}^{(j)} = {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(j)}$.

Базисные векторы элементарных ячеек некоторых простых решеток имеют в Nat -системе следующий вид:

Примитивная кубическая (ПК): $n = 1$,

$${}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(1)} = \{0, 0, 0\}.$$

Объемноцентрированная кубическая (ОЦК): $n = 2$,

$${}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(1)} = \{0, 0, 0\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(2)} = \{1/2, 1/2, 1/2\}.$$

Гранецентрированная кубическая (ГЦК): $n = 4$,

$${}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(1)} = \{0, 0, 0\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(2)} = \{1/2, 1/2, 0\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(3)} = \{1/2, 0, 1/2\}, \\ {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(4)} = \{0, 1/2, 1/2\}.$$

Алмазная решетка: $n = 8$,

$${}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(1)} = \{0, 0, 0\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(2)} = \{1/2, 1/2, 0\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(3)} = \{1/2, 0, 1/2\}, \\ {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(4)} = \{0, 1/2, 1/2\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(5)} = \{1/4, 1/4, 1/4\}, \\ {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(6)} = \{3/4, 3/4, 1/4\}, \quad {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(7)} = \{1/4, 3/4, 3/4\}, \\ {}^{(\text{Nat})}\vec{P}^{(8)} = \{3/4, 1/4, 3/4\}.$$

3 Линейные преобразования решетки

Обозначим \hat{L} оператор линейного преобразования 3-мерного евклидова пространства B_3 . В результате этого преобразования решетка (1) принимает вид

$$\hat{L}\vec{r}^{(j)}(m_1, m_2, m_3) = (m_1 + \alpha_1^{(j)})\hat{L}\vec{a}_1 + (m_2 + \alpha_2^{(j)})\hat{L}\vec{a}_2 + (m_3 + \alpha_3^{(j)})\hat{L}\vec{a}_3. \quad (15)$$

Отсюда находим координаты узлов преобразованной решетки в системе Lat :

$${}^{(\text{Lat})}V_i^{(j)}(m_1, m_2, m_3) = (\vec{e}_i, \hat{L}\vec{r}^{(j)}(m_1, m_2, m_3)) = \\ \sum_{k=1}^3 (m_k + \alpha_k^{(j)}) (\vec{e}_i, \hat{L}\vec{a}_k),$$

$$i = 1, 2, 3; \quad j = 1, 2, \dots, n. \quad (16)$$

Используя (9), находим

$$(\vec{e}_i, \hat{L}\vec{a}_k) = \sum_{p=1}^3 \lambda_{kp} (\vec{e}_i, \hat{L}\vec{e}_p).$$

Подставляя это в (16), получаем

$${}^{(\text{Lat})}V_i^{(j)}(m_1, m_2, m_3) = \sum_{k=1}^3 T_{ik} v_k^{(j)}(m_k), \quad (17)$$

где

$$T_{ik} = \sum_{p=1}^3 \lambda_{kp} (\vec{e}_i, \hat{L}\vec{e}_p) \quad (18)$$

— матрица линейного преобразования векторов

$$v_k^{(j)}(m_k) = m_k + \alpha_k^{(j)}. \quad (19)$$

Для кубических решеток $\lambda_{kp} = \delta_{kp}$, а матрица преобразования векторов принимает вид

$$T_{ik} = (\vec{e}_i, \hat{L}\vec{e}_k), \quad (20)$$

т.е. совпадает с матрицей линейного преобразования \hat{L} в декартовом базисе $\{\vec{e}_i\}_{i=1}^3$.

Приведем явный вид этой матрицы для некоторых простейших преобразований 3-мерного евклидова пространства.

Ортогональное проектирование на плоскость, в которой лежат векторы \vec{e}_1, \vec{e}_2 :

$$(\vec{e}_i, \hat{\Pi}_{12}\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (21)$$

Ортогональное проектирование на две другие координатные плоскости:

$$(\vec{e}_i, \hat{\Pi}_{13}\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (\vec{e}_i, \hat{\Pi}_{23}\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (22)$$

Растяжение в k раз в направлении \vec{e}_3 :

$$(\vec{e}_i, \hat{t}(k)\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & k \end{pmatrix}. \quad (23)$$

Поворот пространства (тела) [6], задаваемый углами Эйлера (α, β, γ) :

$$(\vec{e}_i, \hat{g}^{(Body)}(\alpha, \beta, \gamma)\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \\ \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (24)$$

Поворот осей координат, задаваемый углами Эйлера (α, β, γ) :

$$(\vec{e}_i, \hat{g}^{(Axes)}(\alpha, \beta, \gamma)\vec{e}_j) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \beta \cos \gamma \\ -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma \\ \cos \alpha \sin \beta & \sin \alpha \sin \beta & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (25)$$

Здесь предполагается, что углы Эйлера $\omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ определены следующей процедурой преобразования исходной декартовой системы отсчета S в конечную систему \tilde{S} . Сперва производится поворот на угол $\alpha \in [0, 2\pi)$ вокруг оси \vec{e}_3 исходной системы S , в результате чего система S преобразуется в S' . Затем производится поворот на угол $\beta \in [0, \pi]$ вокруг оси \vec{e}'_2 системы S' , в результате чего система S' преобразуется в S'' . Наконец, производится поворот на угол $\gamma \in [0, 2\pi)$ вокруг оси \vec{e}''_3 системы S'' , в результате чего система S'' принимает окончательное положение \tilde{S} .

Матрица (24) оператора $\hat{g}^{(Body)}(\alpha, \beta, \gamma)$ преобразует координаты произвольной точки P физического пространства относительно исходной системы осей S в координаты этой же физической точки P после ее поворота на угол $\omega = (\alpha, \beta, \gamma)$ (вместе с описанным выше преобразованием систем отсчета $S \rightarrow S' \rightarrow S'' \rightarrow \tilde{S}$) относительно исходной системы координат S .

Матрица (25) оператора $\hat{g}^{(Axes)}(\alpha, \beta, \gamma)$ преобразует координаты произвольной точки P физического пространства относительно системы осей S в координаты этой же физической точки P относительно конечной системы \tilde{S} .

Используя приведенные выше матрицы, легко получить, например, матрицу растяжения вдоль произвольного направления, задаваемого единичным вектором \vec{N} . Обозначим $(\theta_{\vec{N}}, \phi_{\vec{N}})$ его сферические координаты в исходной системе S . Тогда искомое преобразование можно представить в виде произведения трех преобразований. Сперва произведем преобразование $\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}})$ на угол $\omega_{\vec{N}} = (\alpha, \beta, \gamma) = (\phi_{\vec{N}}, \theta_{\vec{N}}, \gamma)$ (γ имеет произвольное значение). В результате этого поворота полярная ось \vec{e}_3 системы отсчета \tilde{S} окажется направленной вдоль вектора \vec{N} , а в результате преобразования $\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}})$ координаты

всех точек физического пространства будут отсчитываться относительно осей системы \tilde{S} . Поэтому растяжение в k раз вдоль вектора \vec{N} эквивалентно тому же растяжению вдоль оси \tilde{e}_3 в системе \tilde{S} , а матрица этого преобразования определяется формулой (23). Наконец, для возвращения в исходную систему S надо произвести поворот, обратный повороту $\omega_{\vec{N}}$, т.е. произвести преобразование $[\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}})]^{-1}$. Нетрудно проверить, что матрицы (24) и (25) являются взаимно обратными, т.е.

$$\hat{g}^{(Body)}(\omega)\hat{g}^{(Axes)}(\omega) = \hat{I}. \quad (26)$$

Следовательно, $[\hat{g}^{(Axes)}(\omega)]^{-1} = \hat{g}^{(Body)}(\omega)$.

Таким образом, искомая матрица растяжения вдоль направления \vec{N} определяется произведением матриц указанных выше преобразований

$$\hat{t}(\vec{N}, k) = \hat{g}^{(Body)}(\omega_{\vec{N}})\hat{t}_{\vec{N}}(k)\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}}), \quad \omega_{\vec{N}} = (\phi_{\vec{N}}, \theta_{\vec{N}}, 0). \quad (27)$$

Аналогичным образом легко получить матрицу проектирования на произвольную плоскость. Зададим эту плоскость единичным вектором \vec{N} , перпендикулярным к ней. Тогда в системе \tilde{S} , полярная ось \tilde{e}_3 которой направлена вдоль \vec{N} , матрица проектирования будет даваться формулой (21), а полная матрица заданного преобразования примет вид

$$\hat{P}_{r12}(\vec{N}) = \hat{\Pi}_{12}^{(\vec{N})}\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}}), \quad \omega_{\vec{N}} = (\phi_{\vec{N}}, \theta_{\vec{N}}, \gamma). \quad (28)$$

Аналогичный вид имеют матрицы проектирования на две другие координатные плоскости системы \tilde{S} :

$$\hat{P}_{r13}(\vec{N}) = \hat{\Pi}_{13}^{(\vec{N})}\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}}), \quad \hat{P}_{r23}(\vec{N}) = \hat{\Pi}_{23}^{(\vec{N})}\hat{g}^{(Axes)}(\omega_{\vec{N}}), \quad (29)$$

где матрицы $\hat{\Pi}_{13}^{(\vec{N})}$ и $\hat{\Pi}_{23}^{(\vec{N})}$ определяются формулами (17).

Далее найдем матрицу проектирования на плоскость, заданную вектором \vec{N} нормали к ней, с предшествующим растяжением в k раз вдоль некоторого направления \vec{N}_1 . Комбинируя преобразования (28) и (27), получаем

$$\begin{aligned} & \hat{P}_{r12}(\vec{N}, \vec{N}_1) = \\ & \hat{\Pi}_{12}^{(\vec{N})}\hat{g}^{(Axes)}(\phi_{\vec{N}}, \theta_{\vec{N}}, \gamma)\hat{g}^{(Body)}(\phi_{\vec{N}_1}, \theta_{\vec{N}_1}, \gamma)\hat{t}_{\vec{N}_1}(k)\hat{g}^{(Axes)}(\phi_{\vec{N}_1}, \theta_{\vec{N}_1}, \gamma). \end{aligned} \quad (30)$$

4 Программа визуализации линейных преобразований кристаллической решетки

Программа `LinTransLattice` позволяет производить в интерактивном (диалоговом) режиме вычисление и графическое представление узлов кристаллической решетки, подвергнутой какому-либо линейному преобразованию из тех, что описаны в разделе 3.

Эта программа предназначена для работы в среде `Mathematica` версии 5.1 и выше. Для ее использования необходимы лишь минимальные навыки работы с этой системой компьютерной математики.

Работа начинается с введения входных параметров. Для этого надо в разделе `Variable input parameters` ввести значения следующих параметров:

1. Тип кристаллической решетки;
2. Декартовы координаты (NX, NY, NZ) вектора \vec{N} , задающего направление оси \vec{e}_3 повернутой системы (Rotated system) отсчета (в единицах основных периодов a_1, a_2, a_3) относительно натуральной системы (Natural system);
3. Минимальные значения $(m1MIN, m2MIN, m3MIN)$ и максимальные значения $(m1MAX, m2MAX, m3MAX)$ индексов Миллера в векторе трансляции $\vec{t}_{m_1 m_2 m_3} = m_1 \vec{a}_1 + m_2 \vec{a}_2 + m_3 \vec{a}_3$;
4. Декартовы координаты (BX, BY, BZ) вектора, задающего направление лоренцевского сжатия решетки (в единицах основных периодов a_1, a_2, a_3) относительно натуральной системы (Natural system);
5. Значение лоренц-фактора γL ;
6. Переключатель `KeyL`, включающий или выключающий лоренцевское сжатие.

После введения входных параметров надо инициировать исполнение программы путем выполнения команд системного меню "Kernel/Evaluation/Evaluate Notebook".

На экране дисплея появляется меню программы `LinTransLattice`, содержащее следующие пункты:

1. Elementary crystal cell in Lattice (Lat) coordinate system

Здесь на экран выводится аксонометрическая проекция элементарной ячейки выбранной кристаллической решетки в Lattice-системе координат (рис. 1).

2. Axes of the Rotated (Rot) coordinate system

Демонстрируется аксонометрическая проекция заданного положения осей повернутой (Rot) системы координат относительно осей системы Lat решетки (рис. 2).

3. 3D crystal lattice in Lat coordinate system

Демонстрируется аксонометрическая проекция заданного фрагмента кристаллической решетки в Lat-системе (рис. 3).

4. 3D crystal lattice in Rot coordinate system

Демонстрируется аксонометрическая проекция заданного фрагмента кристаллической решетки в Rot-системе (рис. 4).

5. 2D projections of the lattice on Lat coordinate plates

Демонстрируются ортогональные проекции заданного фрагмента решетки на 3 координатные плоскости Lat-системы (рис. 5).

6. 2D projections of the lattice on Rot coordinate plates

Демонстрируются ортогональные проекции заданного фрагмента решетки на 3 координатные плоскости Rot-системы (рис. 6 — 7).

7. Exit

Окончание работы программы.

Во всех проекциях кристаллической решетки узлы изображаются цветными кружками. Для удобства наблюдения за преобразованиями решетки узлы элементарной ячейки представляются кружками, различающимися размером и цветом. Кроме того, они снабжаются порядковыми номерами в соответствии с образцом ячейки, который демонстрируется в п.1 меню программы LinTransLattice.

При выводе на экран дисплея очередного рисунка в памяти компьютера продолжают сохраняться все предыдущие. Поэтому пользователю предоставляется возможность их удобного сравнения друг с другом.

5 Иллюстрации

В качестве примера использования программы LinTransLattice на рис. 1 — 7 приведены экранные копии рисунков, полученных для решетки алмаза при следующих значениях входных параметров:

$$(NX, NY, NZ) = (1, -1, 0)$$

$$(m1MIN, m2MIN, m3MIN) = (-1, -1, -1)$$

$$(m1MAX, m2MAX, m3MAX) = (1, 1, 1)$$

$$(BX, BY, BZ) = (1, 1, 1), \quad \gamma L = 1, \quad KeyL = 0.$$

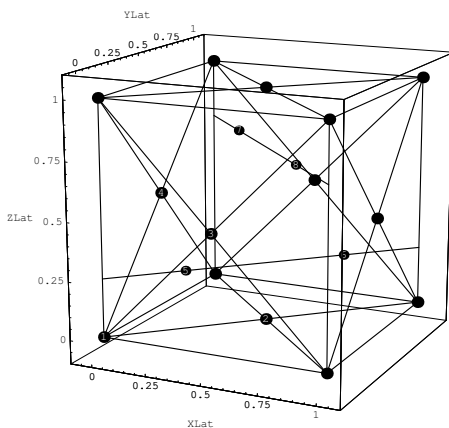


Рис. 1: Элементарная кристаллическая ячейка в Lat-системе.

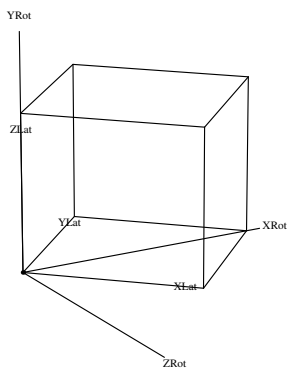


Рис. 2: Оси повернутой (Rot) координатной системы относительно осей Lat-системы.

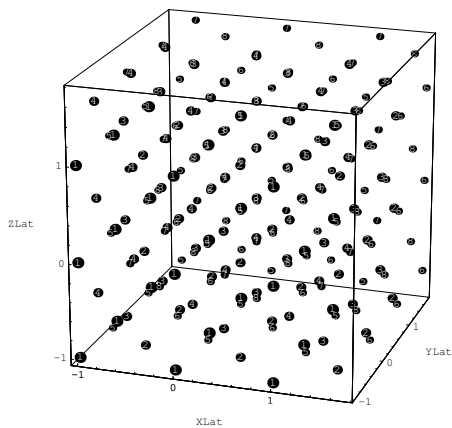


Рис. 3: Кристаллическая решетка в Lat-системе.

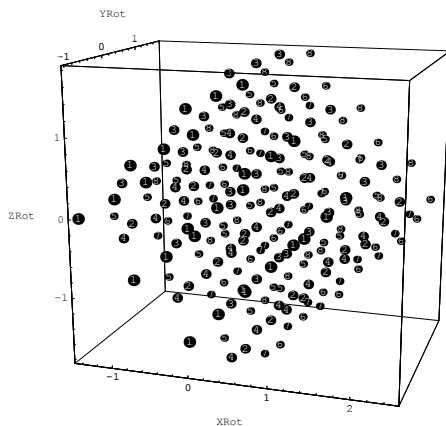


Рис. 4: Кристаллическая решетка в Rot-системе.

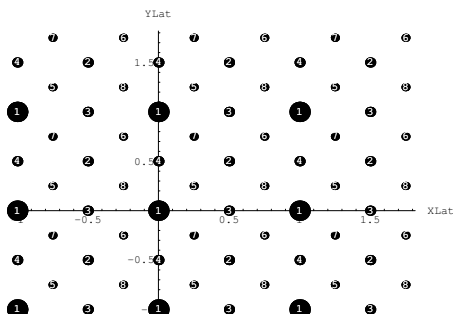


Рис. 5: Проекция кристаллической решетки на плоскость X – Y в Lat-системе.

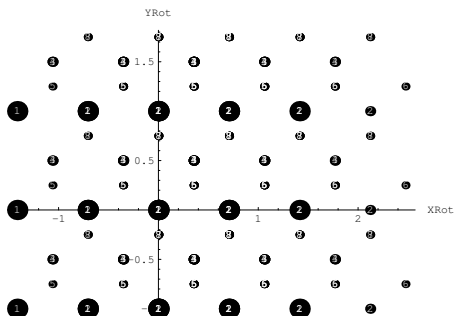


Рис. 6: Проекция кристаллической решетки на плоскость $X - Y$ в Rot-системе.

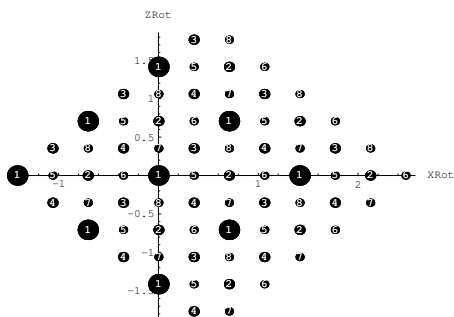


Рис. 7: Проекция кристаллической решетки на плоскость $X - Z$ в Rot-системе.

Работа выполнена при поддержке Российского фонда фундаментальных исследований (гранты # 06-02-17367, # 08-02-08690).

Литература

- [1] Калашников Н. П. Когерентные взаимодействия заряженных частиц в монокристаллах. —М., 1981.
- [2] Balashov V. V., Sokolik A. N., Stysin A. V. Angular anisotropy of the RCE X-rays under planar channeling as manifestation of geometrical properties of the in-crystal electric field. Nucl. Instr. Meth. Phys.Res. B 267(2009)1772.
- [3] Балашов В. В., Долинов В. К., Соколик А. А. Поляризация фотонов, испускаемых в процессе резонансного когерентного возбуждения релятивистских ионов в условиях плоскостного каналирования. Письма в ЖЭТФ 89(2009)463.
- [4] Ильин В. А., Позняк Э.Г. Линейная алгебра. —М., 1974.
- [5] Киттель Ч. Введение в физику твердого тела. —М., 1978.
- [6] Варшалович Д. А., Москалев А. Н., Херсонский В. К. Квантовая теория углового момента. —Л., 1975.

Содержание

1 Введение	3
2 Кристаллическая решетка	4
3 Линейные преобразования решетки	6
4 Программа визуализации линейных преобразований кристаллической решетки	10
5 Иллюстрации	12
Литература	16