Твердотельная электроника

УДК 531.7÷621.38

А.В. Борисов, канд. техн. наук, **Л.Н. Королевич, А.В. Шевлякова**
Национальный технический университет Украины «Киевский политехнический институт»,
ул. Политехническая, 16, корпус 12, г. Киев, 03056, Украина.

Математическая модель межузлового аспекта пространственной кристаллической решётки

В работе рассматривается проблематика математической инвариантности межузлового аспекта кристаллической решётки. Благодаря введению понятия кристаллосферической системы координат и модифицированной нормальной формы Гессе математически доказана инвариантность описания кристаллической решётки в межузловом аспекте. Последний обобщён на все пространственные фёдоровские группы. Библ. 6, рис. 2, табл. 2.

Ключевые слова: *межузловой аспект, кристаллическая решетка, правильная система точек, группы Федорова, решетка Браве, кристаллофизика, наноэлектроника.*

Введение

В ряде приборов микроэлектроники и наноэлектроники рассматриваются объекты с характеристическим размером 5 нм и менее: сверхрешётки, квантовые нити, квантовые точки (сверхатомы) и т.д. [1]. Естественно, что при таких размерах физических объектов классические методы расчёта их свойств не применимы в силу дискретности строения кристаллической структуры. Для успешного моделирования и расчёта таких объектов необходимо учесть дискретность расположения неподвижных зарядов как внутри объекта (например, ионы примесей), так и на его границах (заряд поверхностных состояний). Последнее может быть решено в рамках рассмотрения объекта в виде дискретного множества точек расположенных упорядоченным образом внутри определённого объёма, т.е. путём замены объекта кристаллической решёткой, которую можно описать в рамках классического (узлового) и межузлового аспектов. Учтя, что в работе [5] рассматриваются только решетки Бравэ, а материальные элементы строения материи (атомы, ионы, радикалы и т.д.) располагаются в элементарной ячейке согласно описанию кристаллической решётки в классическом аспекте, т.е. в группах Фёдорова [2-3,6], весьма актуальным является расширение межузлового аспекта кристаллической решётки на группы Фёдорова классического узлового аспекта.

Постановка задачи

Из того, что решётки Браве являются либо группами либо входят в качестве подгрупп в более высокосимметричные группы Фёдорова сразу следует, что задача расширения межузлового аспекта кристаллической решётки на пространственные группы Фёдорова сводится к доказательству сохранения числа узлов кристаллической ячейки в узловом и межузловом аспектах. С точки зрения групп Фёдорова, последнее утверждение эквивалентно сохранению числа точек правильной системы точек (ПСТ) при переходе от узлового аспекта к межузловому. Отметим, что число точек в ПСТ на одну ячейку может достигать 192, т.е. до 48 точек для описания только одного узла. В силу последнего умозрительный перенос начала отсчёта кристаллической ячейки на необходимую величину в требуемом направлении [5] становится весьма затруднительным. Следовательно, для решения поставленной задачи необходимо разработать метод сравнения ПСТ в классическом аспекте с ПСТ в межузловом аспекте кристаллической решётки. Последнее сводится к выборке точек дискретного пространства (кристаллическая решётка или её ПСТ), попадающих внутрь некого выпуклого многогранника (например, кристаллическая ячейка), и сравнения двух выборок (т.е. числа узлов и числа точек в ПСТ как в классическом, так и межузловом аспектах).

Исходные математические положения

Математически описать кристаллическую решетку можно согласно широко известным законам кристаллографии и кристаллофизики [6], а именно, путём задания векторного базиса решётки векторами с длинами равными соответственным параметрам кристаллической решётки и углами между ними с последующим заданием трансляций ячейки. Иначе говоря, задание кристаллической решётки сводится к формированию массива координат точек дискретного пространства. Таким образом, математически описание некоего конечного объёма кристаллической решётки представляет собой некую матрицу координат узлов кристаллической решётки. Гораздо сложнее обстоит случай описания выпуклого многогранника (кристаллической ячейки), поскольку последний можно описать как в терминах вершин (точек), так и в терминах рёбер (линий) и граней (плоскостей). Рассмотрим эти случаи более подробно.

Задание выпуклого многогранника с помощью вершин приводит к простому заданию их координат. Но задание только координат вершин без указания связей между ними не дает полного представления о многограннике, а так же не дает возможности определения ребер и граней.

Задание многогранника в гранях не имеет недостатков как в предыдущем способе. Однако данный способ требует задания уравнения линий в пространстве проходящих вдоль соответственных рёбер, т.е. системы из двух уравнений для каждого отдельно взятого ребра, что в значительной степени усложняет математическую обработку.

Последний вариант – задание многогранника по средством граней, т.е. задание уравнений плоскостей соответствующих граням многогранника. Очевидно, что данный способ является наиболее целесообразным, поскольку с помощью имеющихся уравнений граней можно найти как уравнения ребер (линий, как решение системы линейных уравнений, составленной из двух уравнений плоскости), так и координаты вершин (точек, как решение системы линейных уравнений составленной из трёх заданных уравнений плоскостей). А также данный способ согласуется с физическим представлением о кристаллической решетке, а именно, плоским сеткам узлов решётки соответствуют уравнения плоскостей многогранника, рядам узлов решётки соответствуют уравнения рёбер многогранника и собственно узлам частного положения решётки соответствуют координаты вершин многогранника.

В соответствии с вышеприведенным, задание выпуклого многогранника сводится к определению уравнений плоскостей каждой его грани. Последнее, тем не менее, является сложной задачей, в силу разнообразия задания уравнения плоскости в трёхмерном декартовом пространстве.

Проблематика задания плоскости в трёхмерном пространстве

Как известно, уравнение плоскости в трёхмерном пространстве в прямоугольной системе координат, в наиболее общем случае, имеет вид [4]

$$Ax + By + Cz + D = 0\,, \qquad (1)$$

где A, B, C и D – некоторые числа, причём коэффициенты A, B, C одновременно не могут быть равными нулю, т.е. если $A = 0$ и $B = 0$, то $C \neq 0$ и т.д.. Сразу отметим, что эта форма обладает лишь математическим смыслом, но лишена не только геометрического, но и физического смысла в силу своей абстракции и, следовательно, применение данной формы к описанию граней выпуклого кристаллического многогранника неразрывно связано с утерей физической и геометрической наглядности описания объекта. Указанные трудности частично преодолеваются путём задания уравнения плоскости в нормированной форме:

$$A_0 x + B_0 y + C_0 z + D_0 = 0\,, \qquad (2)$$

причем коэффициенты A_0, B_0, C_0 и D_0 связаны с A, B, C и D соотношениями

$$A_0 = A/\lambda\,,\ B_0 = B/\lambda\,,\ C_0 = C/\lambda\,,\ D_0 = D/\lambda\,, \quad (3)$$

где

$$\lambda = \pm\sqrt{A^2 + B^2 + C^2}\,. \qquad (4)$$

В подавляющем большинстве случаев знак при λ определяется так, чтобы выполнялось условие $D_0 < 0$, а в случае $D = 0$ выбирается произвольно.

Уравнение плоскости в нормированной форме (2) обладает рядом преимуществ по сравнению с формой (1), которые особенно чётко проявляются в геометрической интерпретации этой формы – так называемой нормальной формы Гессе, которую и рассмотрим более подробно.

Нормальная форма Гессе

Нормальная форма Гессе уравнения плоскости является частным случаем нормированного уравнения плоскости (2) и обычно записывается в виде [4]

$$\cos\alpha \cdot x + \cos\beta \cdot y + \cos\gamma \cdot z - p = 0\,, \qquad (5)$$

где $\cos\alpha = A_0$, $\cos\beta = B_0$, $\cos\gamma = C_0$, $p = D_0 > 0$.

При задании плоскости в нормальной форме Гессе (5) коэффициенты уравнения приобретают геометрический смысл, а именно, $\cos\alpha$, $\cos\beta$, $\cos\gamma$ представляют собой направляющие косинусы нормали плоскости, а p равно расстоянию от плоскости до начала координат. Последнее обуславливает требование противоположности знака при λ знаку при D. Из этого требования сразу следует, что $p = |p| > 0$, т.е. исключает возможность существования отрицательных расстояний (длин), что равнозначно задаёт одну и только одну нормаль плоскости. Тем не менее, и эта форма задания плоскости, в силу наличия ограничения $p = |p| > 0$, обладает рядом недостатков. Рассмотрим эти недостатки на частных примерах.

Параллельные плоскости

Случай параллельных плоскостей характеризуется наличием принципиально разных форм их описания, что усложняет наглядность их описания. Для иллюстрации последнего рассмотрим плоскость

$$\cos\alpha_1 \cdot x + \cos\beta_1 \cdot y + \cos\gamma_1 \cdot z - p_1 = 0 \qquad (6)$$

и определим форму уравнения плоскости параллельной (6), но расположенную по другую сторону относительно начала координат

$$\cos\alpha_2 \cdot x + \cos\beta_2 \cdot y + \cos\gamma_2 \cdot z - p_2 = 0\,. \qquad (7)$$

Из определения нормальной формы Гессе сразу следует, что $p_1 = |p_1| > 0$, $p_2 = |p_2| > 0$, а требование параллельности приводит к такой системе уравнений

$$\begin{cases} \cos\alpha_1 = -\cos\alpha_2, \\ \cos\beta_1 = -\cos\beta_2, \\ \cos\gamma_1 = -\cos\gamma_2. \end{cases} \qquad (8)$$

Решая эту систему, получим соотношение между соответственными направляющими углами $\alpha_2 = \pi - \alpha_1$, $\beta_2 = \pi - \beta_1$ и $\gamma_2 = \pi - \gamma_1$, а уравнение (7) запишется в виде

$$-\cos\alpha_1 \cdot x - \cos\beta_1 \cdot y - \cos\gamma_1 \cdot z - p_2 = 0\,. \qquad (9)$$

Геометрически полученный результат означает, что рассмотренные параллельные плоскости характеризуются противоположно направленными нормалями. С другой стороны, полученный результат прямо противоречит принятому в кристаллофизике описанию плоскостей при помощи индексов Миллера, а именно, равенству направлений нормалей всех параллельных плоскостей. Как следствие, использование нормальной формы Гессе приводит к усложнению математического описания как параллельного переноса плоскости (трансляции в кристаллическом пространстве), так её вращения относительно начала координат. Попытка же устранения указанного недостатка математически верным путём умножения на минус единицу уравнения (9) приводит последнее к виду

$$\cos\alpha_1 \cdot x + \cos\beta_1 \cdot y + \cos\gamma_1 \cdot z + p_2 = 0\,, \qquad (10)$$

т.е. к условию $p_2 < 0$ и, как следствие, к утере геометрического смысла.

Плоскость проходящая через начало координат

Случай рассмотрения плоскости, проходящей через начало координат, характеризуется наличием неоднозначности задания плоскости и утерей геометрического смысла, т.е. нормальная форма Гессе принимает вид

$$\cos\alpha \cdot x + \cos\beta \cdot y + \cos\gamma \cdot z = 0\,, \qquad (11)$$

что приводит к разрешению умножения уравнения (9) на минус единицу. Вследствие этого, получаем два равноправных описания этой плоскости частного положения, или, другими словами, существует произвол выбора направления нормали плоскости. Однако, как указанно выше, каждой плоскости в нормальной форме Гессе соответствует лишь одна нормаль, из чего сразу следует, что наличие двух нормалей у одной и той же плоскости прямо противоречит исходным положениям нормальной формы Гессе.

Резюмируя сказанное, можно отметить, что основные недостатки нормальной формы Гессе связанны прежде всего с игнорированием того факта, что у каждой плоскости есть две геометрически полноправных нормали, отличающиеся лишь противоположностью направления. Более того, специфика задания формы Гессе привязана к началу координат, что усложняет правильность выбора той или иной нормали в частных случаях. Разрешим указанные сложности путём рассмотрения задачи о задании координатного направления и, как следствие, о задании направления нормали плоскости.

Координатное направление и кристаллосферическая система координат

Как известно, любое координатное направление в трёхмерном декартовом пространстве можно задать при помощи двух углов, а именно, зенитного (θ) и азимутального (φ). Геометрически эти углы, будучи отложенными от осей Z и X соответственно, характеризуют некое полярное направление P, вдоль которого направлен вектор OA, причём конец этого вектора удалён от начала координат на расстояние ρ (рис. 1).

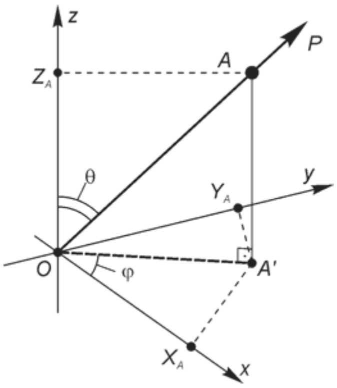

Рис. 1. Изображение кристаллосферической система координат

Исходя из величин углов θ, φ и расстояния ρ можно установить однозначную связь координат конца вектора OA с декартовой системой координат. Так из прямоугольного треугольника ΔAOZ_A сразу следует

$$z = \rho \cdot \cos\theta\,; \tag{12}$$

из прямоугольного треугольника $\Delta AOA'$

$$OA' = \rho \cdot \sin\theta\,; \tag{13}$$

далее из прямоугольных треугольников $\Delta A'X_AO$ и $\Delta A'Y_AO$ получаем

$$x = \rho \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi \text{ и } y = \rho \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi\,. \tag{14}$$

Резюмируем полученный результат в виде системы соотношений прямого перехода

$$\begin{cases} x = \rho \cdot \sin\theta \cdot \cos\varphi, \\ y = \rho \cdot \sin\theta \cdot \sin\varphi, \\ z = \rho \cdot \cos\theta. \end{cases} \tag{15}$$

Полученные выражения (15) являются однозначными и позволяют задать точку в виде набора чисел (θ,φ,ρ) – координат в системе координат, которую назовём кристаллосферической. Несмотря на то, что полученные формулы (15) тождественны формулам перехода от сферической системы к декартовой системе координат, они, тем не менее, не являются таковыми в силу того, что в кристаллосферической системе координат, в отличие от сферической, не определенна привязка конца вектора OA к положительному направлению полярной оси P. Иными словами, величина ρ в кристаллосферической системе координат обозначает координату точки на полярной оси P относительно начала координат O, т.е. величина ρ может принимать любые значения – как положительные, так и отрицательные и быть равной нулю.

Для установления главных диапазонов изменения углов в кристаллосферической системе координат произведем анализ взаимосвязи всевозможных вариаций координат (θ,φ,ρ) с соответственными координатами в прямоугольной декартовой системе координат. Для этого воспользуемся формулами (15), в которые подставим все возможные комбинации знаков косинусов и синусов θ и φ, а также вариаций значений знака ρ. Очевидно, что избыточные варианты легко контролировать по знакам получаемых при этом декартовых координат, т.е. по принадлежности к тому или иному октанту. Все 32 возможных варианта сведены в следующую табл. 1.

Таблица 1. Кристаллосферические координаты

№ п/п	Параметры кристаллосферической системы координат					Соответствующие декартовые координаты		
	$\sin\theta$	$\cos\theta$	$\sin\varphi$	$\cos\varphi$	ρ	X	Y	Z
1	+	+	+	+	+	+	+	+
2	+	+	+	+	–	–	–	–
3	+	+	+	–	+	–	+	+
4	+	+	+	–	–	+	–	–
5	+	+	–	+	+	+	–	+
6	+	+	–	+	–	–	+	–
7	+	+	–	–	+	–	–	+
8	+	+	–	–	–	+	+	–
9	+	–	+	+	+	+	+	–
10	+	–	+	+	–	–	–	+
11	+	–	+	–	+	–	+	–
12	+	–	+	–	–	+	–	+

Продолжение табл. 1.

13	+	–	–	+	+	+	–	–
14	+	–	–	+	–	–	+	+
15	+	–	–	–	+	–	–	–
16	+	–	–	–	–	+	+	+
17	–	+	+	+	+	–	–	+
18	–	+	+	+	–	+	+	–
19	–	+	+	–	+	+	–	+
20	–	+	+	–	–	–	+	–
21	–	+	–	+	+	–	+	+
22	–	+	–	+	–	+	–	–
23	–	+	–	–	+	+	+	+
24	–	+	–	–	–	–	–	–
25	–	–	+	+	+	–	–	–
26	–	–	+	+	–	+	+	+
27	–	–	+	–	+	+	–	–
28	–	–	+	–	–	–	+	+
29	–	–	–	+	+	–	+	–
30	–	–	–	+	–	+	–	+
31	–	–	–	–	+	+	+	–
32	–	–	–	–	–	–	–	+

Легко видеть избыточность задания всевозможных числовых значений координат (θ,φ,ρ). Иначе говоря, всевозможные варианты координат точки в кристаллосферической системе координат относительно знака при $\sin\theta$ приводят к вырождению в декартовой системе координат. А именно, имеется два тождественных набора вариантов задания точки в декартовой системе координат как для $\sin\theta < 0$, так и для $\sin\theta > 0$. В силу последнего, следует ввести ограничение на диапазон изменения величины зенитного угла. Таковым условием будем считать случай $\sin\theta < 0$, поскольку при этом диапазон изменения зенитного угла определяется как $\theta \in [0; \pi]$. Более того, введённое ограничение тождественно классическому ограничению диапазона зенитного угла в сферической системе координат. С учётом введённого ограничения, число вариантов понижается с 32 до 16 (строки 1-16 в табл. 1).

Аналогично предыдущему случаю, легко видеть избыточность задания всевозможных числовых значений координаты φ, при выполнении условия $\sin\theta > 0$. Точнее, имеется два тождественных набора вариантов задания точки в декартовой системе координат как для $\cos\varphi < 0$ (строки 3, 4, 7, 8, 11, 12, 15, 16 в табл. 1), так и для $\cos\varphi > 0$ (строки 1, 2, 5, 6, 9, 10, 13, 14 в Табл. 1). В силу последнего, следует ввести ограничение на диапазон изменения величины азимутального угла. Таковым условием будем считать случай $\cos\varphi > 0$, поскольку при этом диапазон изменения азимутального угла определяется как $\varphi \in [-\pi/2; \pi/2]$. Более того, введённое ограничение является отличительной чертой кристаллосферической системы от классической сферической системы координат. Таким образом, окончательно имеем 8 вариантов из 32.

Сравним между собой полученные чётные (строки 2, 6, 10, 14 в табл. 1) и нечётные (строки 1, 5, 9, 13, в табл. 1) варианты задания координат точки. Так для вариантов 1 и 2 имеем следующие соответствия координат в кристаллосферической и декартовой системах $(+,+,+) \to (+,+,+)$ и $(+,+,-) \to (-,-,-)$, т.е. инверсии относительно начала координат в декартовой системе координат соответствует инверсия знака только координаты ρ в кристаллосферической системе координат. Аналогичная ситуация наблюдается и у других оставшихся вариантов, из чего сразу следует аполярность задания направления в кристаллосферической системе координат. Последнее поясняется тем фактом, что полярность направлению в декартовой системе координат придаёт знак при координате ρ, тогда как в кристаллосферической системе координат направление аполярно и инвариантно знаку при координате ρ. Последнее эквивалентно тому, что в кристаллосферической системе координат главное значение имеют лишь 4 октанта из 8, а наполнение оставшихся 4 октантов контролируется знаком при координате ρ. Другими словами, зенитный и азимутальный углы в кристаллосферической системе координат равноправно описывают противоположные относительно начала координат точки противоположных октантов декартовой системы координат.

Из того, что координаты точки пространства можно рассматривать как координаты конца радиус-вектора и, в частном случае, как координаты вектора перпендикулярного некой плоскости, следует применимость полученных результатов к исследованию уравнения плоскости в нормальной форме Гессе.

Модификация нормальной формы Гессе

Применяя концепцию кристаллосферической системы координат к нормальной форме Гессе легко получить модифицированную нормальную форму Гессе. Так введённая трактовка координаты ρ кристаллосферической системы координат сразу приводит к тому, что параметр p нормальной формы Гессе может принимать любые значения, при этом не накладывается каких-либо иных ограничений на величины направляющих косинусов. В результате модифицированная нормальная форма Гессе примет вид

$$\cos\alpha \cdot x + \cos\beta \cdot y + \cos\gamma \cdot z + p_c = 0, \quad (16)$$

где p_c – координата на оси, проходящей и со направленной с вектором $(\cos\alpha; \cos\beta; \cos\gamma)$.

По сравнению с исходной нормальной формой Гессе (5) эта форма лишена её главного недостатка, а именно, возможно умножение на минус единицу без потери геометрического смысла, поскольку при этом геометрически уравнение плоскости не изменяется. Действительно, умножение на минус единицу изменяет направление нормали и направление отсчета точки пересечения плоскости с прямой проходящей вдоль нормали. В силу последнего, геометрический смысл коэффициентов уравнения плоскости сохраняется, поскольку при этом изменяется как отсчётная точка – вектор нормали плоскости, так и направление отсчёта точки пересечения нормали с плоскостью.

С точки зрения наличия двух равноправных нормалей плоскости данная форма не привязана к какой-либо конкретной из них, что существенно облегчает обработку результатов. Более того, неоднозначность выбора той или иной нормали всегда может быть устранена путём расчёта направляющих косинусов нормали из координат нормали плоскости в кристаллосферической системе координат. Очевидно, что при этом у параллельных плоскостей $(\cos\alpha; \cos\beta; \cos\gamma)$ будут идентичны. Последнее является несомненным преимуществом применения кристаллосферической системы координат для определения координат нормали плоскости даже в случае когда $p_c = 0$. Также отметим, что в отмеченной форме сохраняется инвариантность направляющих косинусов нормали плоскости при параллельном переносе (трансляции начала системы координат), т.е. данная форма задания плоскости, будучи примененной к задачам кристаллофизики, обладает и физическим смыслом.

Выборка дискретного пространства конечноразмерным выпуклым многогранником

Под выпуклым многогранником будем понимать такую геометрическую фигуру, все внутренние межгранные углы которой меньше π. Из требования выпуклости фигуры сразу следует, что по отношению к любой из граней такого многогранника сам многогранник целиком располагается в одном из полупространств (положительном или отрицательном), образуемых плоскостью, содержащей указанную грань. В силу последнего факта логичным способом описания многогранника будет задание его граней в модифицированной форме Гессе таким образом, чтобы нормаль к каждой из его граней располагалась либо в том же полупространстве где и сам многогранник, либо в противоположным. В случае когда нормаль направлена в сторону многогранника, то такой способ задания многогранника будем называть положительным, а в противном случае – отрицательным.

Из определения выпуклости многогранника и описанного способа задания плоскостей граней легко получить метод выборки из дискретного набора тех точек, которые принадлежат объему заданного многогранника.

Алгоритм данного метода рассмотрим на примере выборки узлов из решетки типа алмаза (Федоровская группа $Fd\bar{3}m$). Положим, что в данной решетке размещен икосаэдр с центром в точке $(1,1,1)$, с длинной ребра равной 1 и сориентированный в ячейке таким образом как показано на рис. 2. Расчетные параметры значений коэффициентов плоскостей рассматриваемого икосаэдра в нормальной и в модифицированной формах Гессе сведены в табл. 2.

Принадлежность той или иной точки кристаллической решетки к объему икосаэдра легко проверить подставляя координаты точки в систему уравнений икосаэдра.

Пример расчета знаков подстановки координат точек находящихся внутри и вне объема икосаэдра в уравнения плоскостей его граней сведены в табл. 2. Поступая аналогично со всеми точками заданного дискретного пространства, убедимся что в объем заданного икосаэдра попадает 17 узлов из 95, последние на рис. 2 обозначены черным цветом.

Как видно из табл. 2. применение нормальной формы Гессе не позволяет производить выборку точки дискретного пространства поскольку не зависимо от расположения точки не наблюдается постоянство знака. С другой стороны, как и отмечалось выше, использование модифицированной формы приводит к тому, что наблюдается постоянство знака для точки внутри пространства и знакопеременность в противоположном случае. Не трудно видеть несомненные преимущества применения модифицированной формы Гессе для определения принадлежности точки объему, ограниченному заданным икосаэдром.

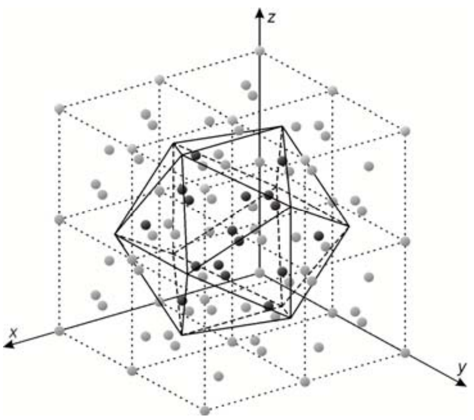

Рис. 2. Схема икосаэдра, помещённого в решётку типа алмаза ($Fd\bar{3}m$). Серые точки – узлы, которые находяться вне икосаэдра, черные точки – внутри него

Таблица 2. Сравнение форм Гессе

№ п/п	форма Гессе								положение точки			
	нормальная				модифицированная				внутри		вне	
	$\cos\alpha_N$	$\cos\beta_N$	$\cos\gamma_M$	ρ_N	$\cos\alpha_M$	$\cos\beta_M$	$\cos\gamma_M$	ρ_M	i_N	i_M	o_N	o_M
1	$+o$	$-\upsilon$	$-\kappa$	$u+2\kappa$	o	$-\upsilon$	$-\kappa$	$u+2\kappa$	+	+	+	+
2	$-\kappa$	$+o$	$-\upsilon$	$u+2\kappa$	$-\kappa$		$-\upsilon$	$u+2\kappa$	+	+	+	+
3	$-\upsilon$	$-\kappa$	$+o$	$u+2\kappa$		$-\kappa$	$+o$	$u+2\kappa$	+	+	+	+
4		$-\upsilon$	$-\kappa$	$2\kappa-v$	$+o$	$+\upsilon$	$+\kappa$	$v-2\kappa$	–	+	–	+
5	$-\kappa$	$-o$	$-\upsilon$	$2\kappa-v$	$+\kappa$	$+o$	$+\upsilon$	$v-2\kappa$	–	+	+	–
6	$-\upsilon$	$-\kappa$	$-o$	$2\kappa-v$	$+\upsilon$	$+\kappa$	$+o$	$v-2\kappa$	–	+	–	+
7	$+o$	$+\upsilon$	$-\kappa$	v	$+o$	$+\upsilon$	$-\kappa$	v	+	+	+	+
8	$-\kappa$	$+o$	$+\upsilon$	v	$-\kappa$	$+o$	$+\upsilon$	v	+	+	+	+
9	$+\upsilon$	$-\kappa$	$+o$	v	$+\upsilon$	$-\kappa$	$+o$	v	+	+	+	+
10	$+o$	$-\upsilon$	$+\kappa$	v	$+o$	$-\upsilon$	$+\kappa$	v	+	+	+	+
11	$+\kappa$	$+o$	$-\upsilon$	v	$+\kappa$	$+o$	$-\upsilon$	v	+	+	+	+
12	$-\upsilon$	$+\kappa$	$+o$	v	$-\upsilon$	$+\kappa$	$+o$	v	+	+	–	–
13	$-\iota$	$-\iota$	$+\iota$	$w+4\iota$	$-\iota$	$-\iota$	$+\iota$	$w+4\iota$	+	+	+	+
14	$-\iota$	$-\iota$	$-\iota$	$2\iota-w$	ι	$+\iota$	$+\iota$	$w-2\iota$	–	+	+	–
15	$+\iota$	$-\iota$	$-\iota$	$w+2\iota$	ι	$-\iota$	$-\iota$	$w+2\iota$	+	+	+	+
16	$-\iota$	ι	$-\iota$	$w+2\iota$	$-\iota$	$+\iota$	$-\iota$	$w+2\iota$	+	+	+	+
17	$-\iota$	$-\iota$	$+\iota$	$w+2\iota$		$-\iota$	$+\iota$	$w+2\iota$	+	+	+	+
18	$-\iota$	$+\iota$	$+\iota$	w	$-\iota$	$+\iota$	$+\iota$	w	+	+	–	–
19	$+\iota$	$-\iota$	$+\iota$	w	$+\iota$	$-\iota$	$+\iota$	w	+	+	+	+
20	$+\iota$	$+\iota$	$-\iota$	w	$+\iota$	$+\iota$	$-\iota$	w	+	+	+	+

Столбцы «i_N» и «o_N» результаты подстановки координат точек в классическую форму Гессе, а «i_M» и «o_M» – в модифицированную форму Гессе.

Применяемые значения: $\iota = 3^{-1/2}$, $o = 0$, $\kappa = \varphi/3^{1/2}$, $\upsilon = (\varphi-1)/3^{1/2}$,

где $u = (\varphi^2+2)/2\cdot 3^{1/2}$, $v = (\varphi^2-2)/2\cdot 3^{1/2}$, $w = (-1+\varphi)/2\cdot 3^{1/2}$, где $\varphi = (1+5^{1/2})/2$.

Межузловой аспект кристаллической решетки и его обобщение на Федоровские группы

Применяя разработанный метод выборки дискретного пространства к межузловом аспекту кристаллической решетки [5] легко убедиться в математической верности приведенных там результатов.

Рассматривая узлы кристаллической решетки каждой федоровской группы как центр ПСТ легко расширить понятие межузлового аспекта и на данные кристаллические группы. Для этого необходимо произвести те же сдвиги начала системы координат, что и в решетках Браве [5], но с тем лишь отличием, что при этом нужно контролировать сохранение уже не только числа узлов пространственной ячейки но и сохранение числа точек, формирующих ПСТ данной группы. Иными словами, необходимо показать инвариантность числа узлов и инвариантность числа ПСТ при переходе от узлового аспекта к межузловому для каждой отдельно взятой Федоровской группы.

Применяя для любой федоровской группы описанный выше метод выборки для дискретного пространства точек ПСТ и узлов кристаллической решетки в узловом аспекта, приходящихся на одну пространственную ячейку межузлового аспекта, легко доказать равенство этих величин аналогичным величинам, приходящимся на одну пространственную ячейку узлового аспекта. Из последнего сразу следует, что описание пространственной кристаллической решетки в межузловом аспекте для всех федоровских групп тождественно описанию той же группы в узловом аспекте. Иначе говоря, доказана математическая непротиворечивость описания пространственной кристаллической решетки в узловом и межузловом аспектах.

Выводы

1. Любой замкнутый выпуклый кристаллический многогранник можно задать системой уравнений плоскостей его граней.
2. Введена новая система координат – кристаллосферическая, которая позволяет уменьшить число равнозначных направлений с 8 до 4 и, как следствие, удалить неопределённость задания нормали плоскости.
3. Разработана новая форма задания уравнения плоскости – модифицированная нормальная форма Гессе, обладающая, в отличие от классической нормальной формы Гессе, геометрическим и физическим смыслом в более широких диапазонах изменения параметров формы.
4. Показаны существенные преимущества применения модифицированной нормальной формы Гессе по сравнению с классической нормальной формой. К ним, в частности, относится согласованность математического описания параллельных плоскостей с физическим описанием.
5. Разработан метод решения задачи о выборке узлов (точек) дискретного пространства, попадающих внутрь замкнутого выпуклого многогранника.
6. Произведено обобщение межузлового аспекта кристаллической решетки на группы Фёдорова.
7. Доказана математическая непротиворечивость описания пространственной кристаллической решетки в узловом и межузловом аспектах.

Список использованных источников

1. *Ahn C.H., Senthil K., Cho H.K., & Lee S.Y.* (2013). Artificial semiconductor/insulator superlattice channel structure for high-performance oxide thin-film transistors. *Scientific Reports*, *3*, 1-4.
2. *Hahn, Th.* (Eds.) (2005) *International tables ror crystallography*. (5th ed., Vol. A). Springer.
3. *Бокий Г.Б.* Кристаллохимия / Г.Б. Бокий. – 2-я ред. – М.: Издательство Московского университета, 1960. – 357 с.
4. *Делоне Б.Н.* Аналитическая геометрия. в 2-х т. Т.2 / Б.Н. Делоне и Д.А. Райков –, М.-Л.: ГИТТЛ, 1949. – 516 с.
5. *Королевич Л.Н.* Межузловой аспект кристаллической решетки / Л.Н. Королевич, А.В. Борисов, М.К. Родионов // Электроника и связь. Тематический выпуск "Электроника и нанотехнологии". – 2011 – №4(63) – С. 32-38.
6. *Сиротин Ю.И.* Основы кристаллофизики / Шаскольская М.П. – 2 ред. – М.: Главная редакция физико-математической литературы"Наука", 1979 – 640 с.

Поступила в редакцию 2 сентября 2015 г.

УДК 531.7÷621.38

О.В. Борисов, канд. техн. наук, **Л.М. Королевич, Г.В. Шевлякова**
Національний технічний університет України «Київський політехнічний інститут»,
вул. Політехнічна, 16, корпус 12, м. Київ, 03056, Україна.

Математична модель міжвузлового аспекту просторової кристалічної решітки

В роботі розглядається проблематика математичної інваріантності міжвузлового аспекту кристалічної решітки. Завдяки введенню поняття кристалосферичної системи координат й модифікованої нормальної форми Гессе математично доведена інваріантність опису кристалічної решітки у міжвузловому аспекті. Останній узагальнено на всі просторові групи Федорова. Библ. 6, рис. 2, табл. 2.

Ключові слова: *міжвузловий аспект; кристалічна решітка; правильна система точок; групи Федорова; решітка Браве; кристалофізика; наноелектроніка.*

UDC 531.7+621.38

O. Borysov Ph.D., **L. Korolevych, H. Shevlyakova**
National Technical University of Ukraine “Kyiv Polytechnic Institute”,
st. Politekhnichna, 16, Kyiv, 03056, Ukraine.

Mathematical model of intersites aspect of space crystal lattice

The paper deals with the problems of mathematical invariance of intersites aspect of the crystal lattice. With the introduction of the concept of crystal-spherical coordinate system and the modified Hessian normal form mathematically proved the invariance of the description of the crystal lattice in the intersites aspect, which is generalized to all space Fedorov groups. Reference 6, figures 2, tables 2.

Ключові слова: *intersites aspect; crystal lattice; Points; Fedorov groups; Bravais cells; crystallophysics; nanoelectronics.*

References

1. *Ahn, C. H., Senthil, K., Cho. H. K., & Lee, S. Y.* (2013). Artificial semiconductor/insulator superlattice channel structure for high-performance oxide thin-film transistors. Scientific Reports,3, 1-4.
2. *Hahn, Th.* (2005). International tables ror crystallography (5th ed., Vol. A). Springer.
3. *Bokij. G. B.* (1960). Kristallohimiya [Crystallochemistry] (2nd ed). Moskva: Izdatel'stvo Moskovskogo universiteta [in Russian]
4. *Delone, B. N., & Rajkov, D. A.* (1949). Analiticheskaya geometriya [Analytical Geometry] (Vol 2). Moskva-Leningrad: GITTL. (Rus.)
5. *Korolevich, L. N., Borisov, A. V., & Rodionov, M. K.* (2011). Mezhuzlovoy aspekt kristallicheskoy reshetki [Intersites aspect of the crystal lattice]. Elektronika i svyaz. Tematicheskij vypusk "Elektronika i nanotehnologii" (4(63)), P. 32-38. (Rus.)
6. *Sirotin, Ju. I., & Shaskol'skaja, M. P.* (1979). Osnovy kristallofiziki [Fundamentals of crystallophysics] (2nd ed). Moskva: Glavnaja redakcija fiziko-matematicheskoj literatury "Nauka" (Rus.)