

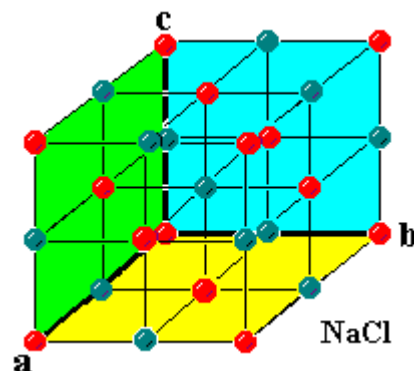
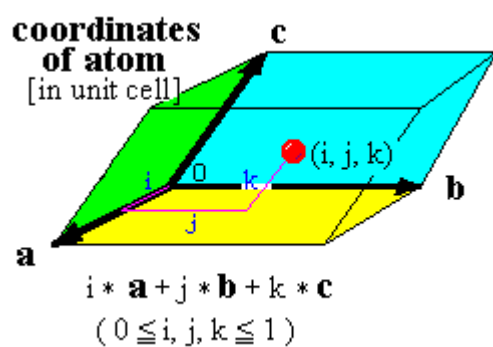
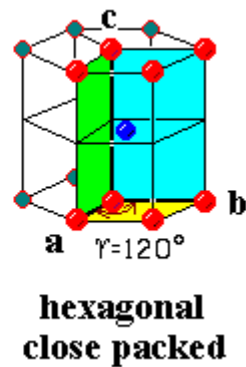
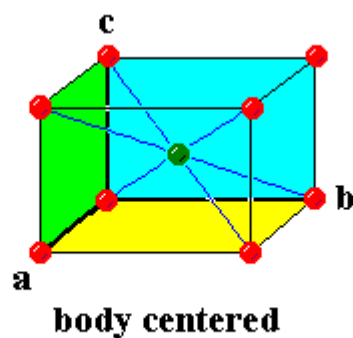
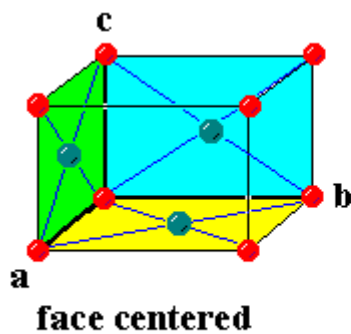
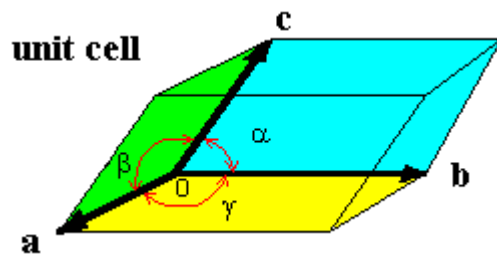
# マルチスライス・アシスタンス

本アプリケーションは、Dr. Earl J. Kirklandによるマルチスライス法プログラムに対する “入力データの作成” を、アシストするものです。

本アプリケーションにおける “ユニットセル” は、次の意味で使います；

- 1) 結晶を構成する「最小の繰り返し構造」で、
- 2) この繰り返し構造の8個の角は、同一の原子である。

## \$1. ユニットセル (unit cell)



## \$2. 入力パラメータ

Set crystal parameters

Lattice constants

a axis (Ang.)	b axis (Ang.)	c axis (Ang.)
3.905	3.905	3.905
alpha (deg.)	beta (deg.)	gamma (deg.)
90	90	90

Coordinates and name of atom in a unit cell

a coordinate	b coordinate	c coordinate
0	0	0
Atom 0	Color pictured	
Sr	[Color]	Next

Crystal direction perpendicular to sliced planes

u	v	w
1	0	0

Cancel OK

### 1. 結晶パラメータ

- \* ユニットの a 軸の値 (単位: オングストローム).
- \* ユニットの b 軸の値 (単位: オングストローム).
- \* ユニットの c 軸の値 (単位: オングストローム).
- \* ユニットの b 軸と c 軸のなす角度( ) (単位: 度).
- \* ユニットの c 軸と a 軸のなす角度( ) (単位: 度).
- \* ユニットの a 軸と b 軸のなす角度( ) (単位: 度).

### 2. マルチスライスを行う面に鉛直な方位 $\langle u \ v \ w \rangle$ の値

### 3. ユニットの構成する原子名とその座標

- \* 原子 0: 座標 (0, 0, 0) の原子

原子 0 の原子名を入力し、表示色を選択して、<Next>ボタンを押します。

注: 原子 0 については、原子名の入力だけで、座標 (0, 0, 0) の値の入力は必要ありません。

- \* 原子 X [注: X = 1, 2, 3, ...]: 座標 (Xa, Xb, Xc) の原子

原子 1 の原子名と座標値を入力し、表示色を選択して、<Next>ボタンを押します。

引き続いて、原子 2, 3, ... に対しても同様にいきます。

ユニットセルを構成する全ての原子について、原子名・座標値・表示色の入力を終了したら、<OK>ボタンを押します (入力する最後の原子の原子名・座標値・表示色を入力し終えた場合は、<Next>ボタンを押さずに、<OK>ボタンを押します)。

注: Xa は a 軸方向の座標値、Xb は b 軸方向の座標値、Xc は c 軸方向の座標値

注: 座標値 Xa, Xb, Xc は、ノーマライズされた値 (つまり、reduced coordinates) を用いる。

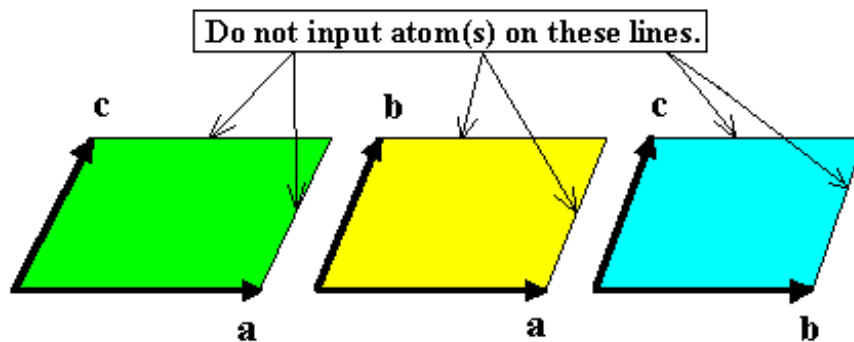
\*\*\*\*\* 重要 \*\*\*\*\*

- \* ユニットの構成する原子で、ユニットセルの稜線にある原子については、\*
- \* 下記の図を参照して、余分な原子の入力をしないように注意してください。\*

\*\*\*\*\*

### 4. その他

方位  $\langle u \ v \ w \rangle$  の値だけを変更して、その他は、直前に使用した入力パラメータをそのまま使用する場合は、新しい  $\langle u \ v \ w \rangle$  の値を入力後、単に<OK>ボタンを押します (この場合、<Next>ボタンを押してはいけません)。



Atoms on the face plane of unit cell

### \$3. 入力パラメータの例

試料は Strontium Titanate ( $\text{SrTiO}_3$ ) です.

マルチスライスを行う面は方位  $\langle 100 \rangle$  に鉛直な面です.

- \* ユニットセルの a 軸の値 3.905 (オングストローム) を入力.
- \* ユニットセルの b 軸の値 3.905 (オングストローム) を入力.
- \* ユニットセルの c 軸の値 3.905 (オングストローム) を入力.
- \* ユニットセルの b 軸と c 軸のなす角度( ) 90 (度)を入力.
- \* ユニットセルの c 軸と a 軸のなす角度( ) 90 (度)を入力.
- \* ユニットセルの a 軸と b 軸のなす角度( ) 90 (度)を入力.
- \* 方位  $\langle u \ v \ w \rangle$  の u の値 1 を入力.
- \* 方位  $\langle u \ v \ w \rangle$  の v の値 0 を入力.
- \* 方位  $\langle u \ v \ w \rangle$  の w の値 0 を入力.
- \* 原子 0 として Sr を選択し、表示色を黒色に選択し、<Next>ボタンを押す.
- \* 原子 1 として O を選択し、その座標を(0.5, 0.5, 0)、表示色を青色に選択し、<Next>ボタンを押す.
- \* 原子 2 として O を選択し、その座標を(0.5, 0, 0.5)、表示色を青色に選択し、<Next>ボタンを押す.
- \* 原子 3 として O を選択し、その座標を(0, 0.5, 0.5)、表示色を青色に選択し、<Next>ボタンを押す.
- \* 原子 4 として Ti を選択し、その座標を(0.5, 0.5, 0.5)、表示色を赤色に選択し、<OK>ボタンを押す (入力する最後の原子の原子名・座標値・表示色を入力し終えた場合は、<Next>ボタンを押さないで、<OK>ボタンを押します).

### \$4. スライス面の原子の表示

入力する最後の原子の原子名・座標値・表示色を入力し終え、<OK>ボタンを押すと、スクリーン上にスライス面の原子が表示されます.

第1のスライス面:左上の絵です.

第2のスライス面:左下の絵です.

第3のスライス面:右上の絵です.

第4のスライス面:右下の絵です.

もし、4面を越えるスライス面が存在する場合は、<Next>ボタンを押すと、次の4面のスライス面が表示されます.

スライス面の表示順序は、常に、

左上 -> 左下 -> 右上 -> 右下  
です.

### \$5. データの保存

- 1) 表示されたスライス面は、ビットマップとして保存することができます.
- 2) 又、入力した結晶パラメータと、スライス面上の原子の座標 (reduced coordinates) は、テキストファイル形式で保存することができます.

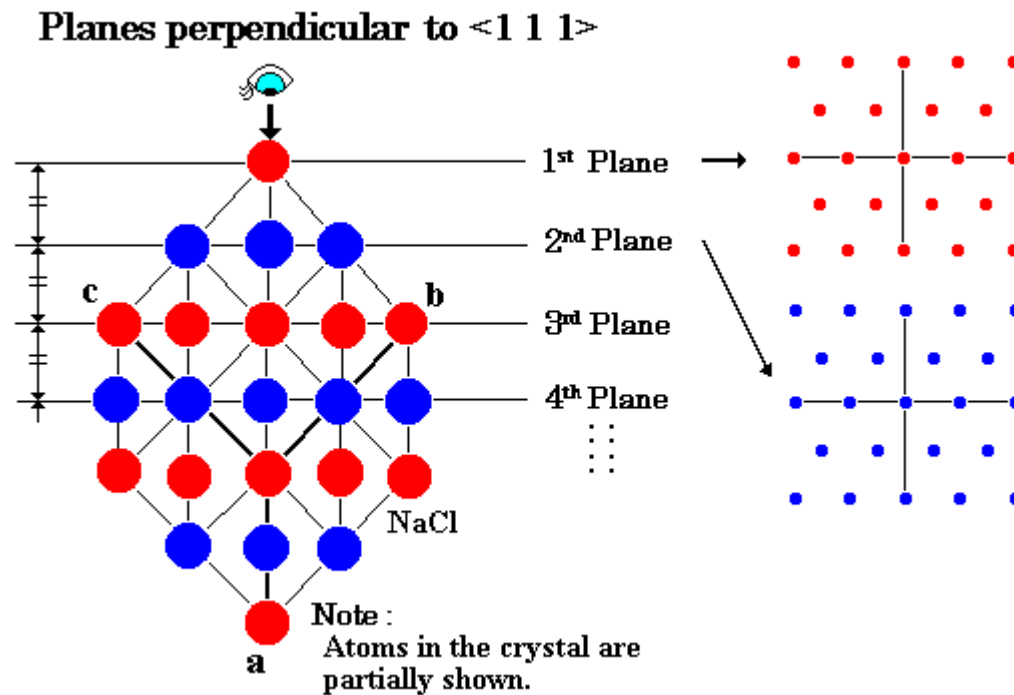
### \$6. 結晶パラメータの読み込み

- 1) 保存された結晶パラメータのファイルは読み込みが可能で、スライス面の表示に使うことができます.

- 2) 添付のファイル(SrTiO3.TXT)は、結晶 SrTiO3 の例で、本アプリケーションで読み込みを行った場合、スライス面の表示をすることができます。

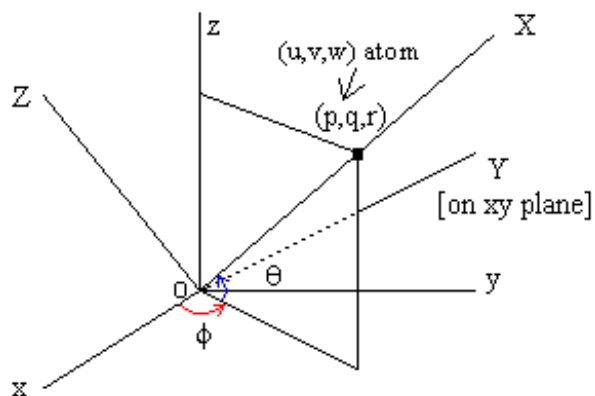
## \$7. 使用例

マルチスライス・アシスタンスを使ったスライス面の原子配列の一例を下記に示します。



## \$8. 補足資料

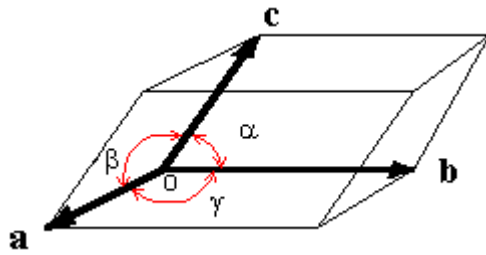
### 8.1) 座標回転



註:  $-90 \text{ deg} \leq \phi \leq +90 \text{ deg}$   
 $-90 \text{ deg} \leq \theta \leq +90 \text{ deg}$   
 $0 \leq p$

$$\begin{aligned} X &= +\cos(\theta) \cdot \cos(\phi) \cdot x + \cos(\theta) \cdot \sin(\phi) \cdot y + \sin(\theta) \cdot z \\ Y &= -\sin(\phi) \cdot x + \cos(\phi) \cdot y \\ Z &= -\sin(\theta) \cdot \cos(\phi) \cdot x - \sin(\theta) \cdot \sin(\phi) \cdot y + \cos(\theta) \cdot z \end{aligned}$$

## 8.2) 結晶



註:  $0 \text{ deg} < \alpha \leq 90 \text{ deg}$   
 $0 \text{ deg} < \beta \leq 90 \text{ deg}$   
 $0 \text{ deg} < \gamma < 180 \text{ deg}$

セル中の原子とセル面上の原子とを含めて、原子の位置を  $(p, q, r)$  とすると、次のようになる。

$$p = u \cdot a$$

$$q = v \cdot b$$

$$r = w \cdot c$$

ここで、

$u, v, w$  は実数で、また、 $0 \leq u$

点  $O$  を  $xyz$  座標の原点に置き、 $a$  軸を  $x$  軸に置き、 $b$  軸を  $xy$  平面上に置くと、点  $(p, q, r)$  は  $xyz$  座標を使って、次のようになる。

$$p = u \cdot |a| + v \cdot |b| \cdot \cos(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \cos(\beta)$$

$$q = v \cdot |b| \cdot \sin(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \frac{\cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)}{\sin(\gamma)}$$

$$r = w \cdot |c| \cdot \frac{\sqrt{1 - \cos(\alpha) \cdot \cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\beta) - \cos(\gamma) \cdot \cos(\gamma) + 2 \cdot \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)}}{\sin(\gamma)}$$

## 8.3) $\phi$ と $\theta$

$$\cos(\phi) = p / \sqrt{p^2 + q^2} \quad ; p=q=0 \text{ を除く}$$

$$\sin(\phi) = q / \sqrt{p^2 + q^2} \quad ; p=q=0 \text{ を除く}$$

$$\cos(\theta) = \sqrt{p^2 + q^2} / \sqrt{p^2 + q^2 + r^2} \quad ; p=q=r=0 \text{ を除く}$$

$$\sin(\theta) = r / \sqrt{p^2 + q^2 + r^2} \quad ; p=q=r=0 \text{ を除く}$$

ここで、

$$p = u \cdot |a| + v \cdot |b| \cdot \cos(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \cos(\beta)$$

$$q = v \cdot |b| \cdot \sin(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \frac{\cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)}{\sin(\gamma)}$$

$$r = w \cdot |c| \cdot \frac{\sqrt{1 - \cos(\alpha) \cdot \cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\beta) - \cos(\gamma) \cdot \cos(\gamma) + 2 \cdot \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)}}{\sin(\gamma)}$$

## 8.4) 入力パラメータ

### (1) ユニットセルのパラメータ:

\*  $|a|, |b|, |c|$  --- 単位: オングストローム

\*  $\alpha, \beta, \gamma$  ----- 単位: 度

\* “AtomName[0]” --- ユニットセルを構成する原子名

### (2) ユニットセル中の原子位置、ユニットセル面上の原子位置、それらの原子名:

\* Atom position (E[i], F[i], G[i]) ----- ユニットセルでの座標 (reduced coordinates)

\* “AtomName[i]” ----- 位置 (E[i], F[i], G[i]) での原子名

註:  $0 \leq E, F, G \leq 1$

$E[0] = F[0] = G[0] = 0$  は、ユニットセルを構成する原子

(3) スライス面に鉛直な結晶方位  $\langle u, v, w \rangle$  :

\*  $u, v, w$  ----- 整数

註:  $\text{abs}(u) + \text{abs}(v) + \text{abs}(w) = 0$  は不可

## 8.5) 計算

(1) “u” の変換:

もし  $u < 0$  ならば、 $u, v, w$  を次のように変換する .

“new”  $u = -u$

“new”  $v = -v$

“new”  $w = -w$

(2)  $\cos(\phi)$ ,  $\sin(\phi)$ ,  $\cos(\theta)$ , and  $\sin(\theta)$  :

$\cos(\phi) = p / \sqrt{p^2 + q^2}$  ;  $p=q=0$  を除く

$\sin(\phi) = q / \sqrt{p^2 + q^2}$  ;  $p=q=0$  を除く

$\cos(\theta) = \sqrt{p^2 + q^2} / \sqrt{p^2 + q^2 + r^2}$  ;  $p=q=r=0$  を除く

$\sin(\theta) = r / \sqrt{p^2 + q^2 + r^2}$  ;  $p=q=r=0$  を除く

ここで、

$$p = u \cdot |a| + v \cdot |b| \cdot \cos(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \cos(\beta)$$

$$q = v \cdot |b| \cdot \sin(\gamma) + w \cdot |c| \cdot \text{abs}\{\cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)\} / \sin(\gamma)$$

$$r = w \cdot |c| \cdot \sqrt{\text{abs}\{1 - \cos(\alpha) \cdot \cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\beta) - \cos(\gamma) \cdot \cos(\gamma) + 2 \cdot \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)\}} / \sin(\gamma)$$

註: “new”  $u$ , “new”  $v$ , “new”  $w$  を使う事 .

(3) 原子位置:

“m-th” 原子の実位置 ( $e[m], f[m], g[m]$ ) {その原子名は  $\text{AtomName}[m]$  とする}:

$$e[m] = (E[m] + i) \cdot |a| + (F[m] + j) \cdot |b| \cdot \cos(\gamma) + (G[m] + k) \cdot |c| \cdot \cos(\beta)$$

$$f[m] = (F[m] + j) \cdot |b| \cdot \sin(\gamma) + (G[m] + k) \cdot |c| \cdot \text{abs}\{\cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)\} / \sin(\gamma)$$

$$g[m] = (G[m] + k) \cdot |c| \cdot \sqrt{\text{abs}\{1 - \cos(\alpha) \cdot \cos(\alpha) - \cos(\beta) \cdot \cos(\beta) - \cos(\gamma) \cdot \cos(\gamma) + 2 \cdot \cos(\alpha) \cdot \cos(\beta) \cdot \cos(\gamma)\}} / \sin(\gamma)$$

ここで、 $E[m], F[m], G[m]$  は “m-th” 原子の位置 ( $E[m], F[m], G[m]$ ) であって、  
8.4) - (2) で xyz 座標で入力されたもの .

また、 $i, j, k$  は全整数 ( $-\infty \sim +\infty$ ) を示す .

なお、 $m = 0, 1, 2, \dots$  ( $m = 0$  はユニットセルを構成する原子を示す .)

(4) 座標回転された ( $X, Y, Z$ ) 座標での “m-th” 原子の位置:

$$X[m] = + \cos(\theta) \cdot \cos(\phi) \cdot e[m] + \cos(\theta) \cdot \sin(\phi) \cdot f[m] + \sin(\theta) \cdot g[m]$$

$$Y[m] = - \sin(\phi) \cdot e[m] + \cos(\phi) \cdot f[m]$$

$$Z[m] = - \sin(\theta) \cdot \cos(\phi) \cdot e[m] - \sin(\theta) \cdot \sin(\phi) \cdot f[m] + \cos(\theta) \cdot g[m]$$

ここで、 $e[m], f[m], g[m], \cos(\phi), \sin(\phi), \cos(\theta), \sin(\theta)$  は、(3) と (2) のものを使う .

(5) 原子位置の表示:

“ $X[\dots] = \text{constant}$ ” と云う条件下で、PC の画面に、それぞれの原子位置 ( $Y[i], Z[i]$ ) を示す .

註:

\* 原子位置を示す(色付き)円 を、正しく表示する .

\* もし  $0 < u$  ならば、原子は  $-X$  から  $+X$  の方向で示す .

逆ならば、 $+X$  から  $-X$  の方向で示す .

\* スーパーセルを示す矩形を、PC の画面の “atom pattern” に表示する .