**Алгоритмы преобразования кристаллографических координат**

Халин Алекcандр Дмитриевич

Московский государственный университет имени М. В. Ломоносова, Геологический факультет, кафедра кристаллографии и кристаллохимии, 1 курс

Научный руководитель – д.х.н. проф. Еремин Н.Н.

В работе рассмотрен вопрос перехода между различными системами координат в кристаллических структурах и метод матричных преобразований параметров ячейки и координат атомов. Была разработана программа на языке C++ (рис. 1) с консольным интерфейсом, позволяющая автоматизировать математические преобразования при переходе от одной системы координат к другой. Программа оперирует текстовыми файлами с описанием кристаллических структур и преобразует их параметры в соответствии с заданной матрицей перехода между координатными системами. Работа программы продемонстрирована на трех примерах (рис. 2): переход из гексагональной системы координат в ромбоэдрическую в структуре кальцита CaCO3; выбор правильной установки пространственной группы у марокита CaMn2O4; переход от минералогической установки к рациональной (кристаллографической) для ортоклаза K(AlSi3O8). Предполагается дальнейшее совершенствование программы и расширение функционала, в частности, автоматический расчет матрицы перехода.

|  |
| --- |
|  |
| Рисунок 1. Блок-схема алгоритма работы программы |
|  |
| Рисунок 2. Рассмотренные кристаллические структуры |

**Литература**

*Загальская Ю.Г., Литвинская Г.П.* Геометрическая микрокристаллография 1976 г.
*Еремин Н. Н., Еремина Т. А.* Неорганическая кристаллохимия, Т.1, 2017 г.
*Егоров-Тисменко Ю. К.* Кристаллография, 2005 г.
*ATOMS: www.*shapesoftware.com