Доклады Академии наук СССР
1970. Том 193, № 3

УДК 548.736 — *КРИСТАЛЛОГРАФИЯ*

Э. А. КУЗЬМИН, В. В. ИЛЮХИН, академик Н. В. БЕЛОВ

ВЫДЕЛЕНИЕ ОСНОВНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ ВЕКТОРНОЙ ПО ПИКУ КРАТНОСТИ ДВА (ОБЩИЙ СЛУЧАЙ, ФЕДОРОВСКАЯ ГРУППА $P1$)

Алгоритм выделения основной системы (о.с.) из векторной (в.с.) по кратным пикам дан в ([1,2]), и было указано, что выделение о.с. тем эффективнее, чем выше кратность N_1 исходного пика в.с. Можно считать пре-

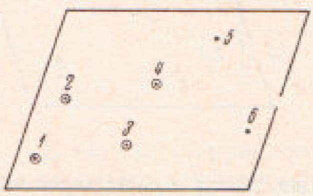


Рис. 1. Основная система из 6 точек. Точки *1—4* удовлетворяют условию (1)

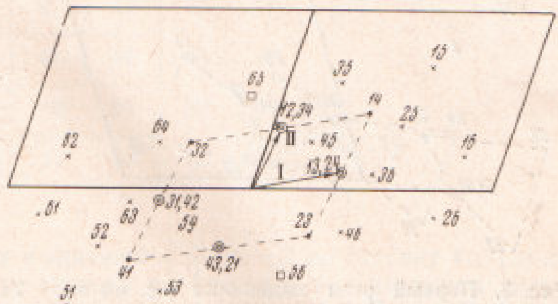


Рис. 2. В.с. для о.с. рис. 1. Выделены векторы $\mathbf{r}_{13}=\mathbf{r}_{24}$ (I) и $\mathbf{r}_{12}=\mathbf{r}_{34}$ (II)

дельным и в то же время наиболее простым случай, когда кратность исходного пика наименьшая и равна двум ($N_1=2$) *, т. е. когда в точечной о.с. из N точек две пары точек с координатами $x_1y_1z_1\ldots x_4y_4z_4$, удовлетворяют условию

$$\mathbf{r}_{12}=\mathbf{r}_{34} \quad (\text{и, следовательно, } \mathbf{r}_{13}=\mathbf{r}_{24}). \tag{1}$$

В соответственной в.с., независимо от того, ацентрична или центросимметрична о.с. (N точек), возникают три линейки, параллельные $\mathbf{r}_{12} \# \mathbf{r}_{34}$ и одновременно еще три линейки, параллельные $\mathbf{r}_{13} \# \mathbf{r}_{24}$ ([3,4]). Не проходящие через центр линейки образуют параллелограмм, в вершинах которого пики однократные, а в серединах сторон — двукратные — они расположены на концах двух (сдвоившихся) линеек, проходящих через начало координат. Таким образом, если в предположении о существовании в о.с. двух пар точек, удовлетворяющих (1), нам удается выделить в в.с. «обещающий» параллелограмм, то пики в серединах его сторон двукратны ** (при условии отсутствия случайных совпадений).

Пусть в в.с. (для о.с. из 6 точек — рис. 1) найден этот параллелограмм (рис. 2). Выбираем за исходный пик любой из 4 двукратных пиков в серединах сторон параллелограмма (вектор I — рис. 2). На первом этапе алгоритма ([1,2]) получаем систему точек — концов векторов, выделенных по вектору I (изображения отрезка *1* по ([5])) — рис. 3. При этом оконтуриваются

* Если исходный пик (или все пики) в.с. однократный, то выделение о.с. осуществляется достаточно быстро по ([5]).

** Если веса исходных 4 точек о.с. Z_1, Z_2, Z_3, Z_4, то веса пиков в вершинах параллелограммов будут Z_1Z_4 (концы векторов $\mathbf{r}_{14}$ и $\mathbf{r}_{41}$) и Z_2Z_3 (концы векторов $\mathbf{r}_{23}$ и $\mathbf{r}_{32}$), а в серединах сторон $Z_1Z_2+Z_3Z_4$ ($\mathbf{r}_{21}+\mathbf{r}_{43}=\mathbf{r}_{12}+\mathbf{r}_{34}$) и $Z_1Z_3+Z_2Z_4$ ($\mathbf{r}_{13}+\mathbf{r}_{24}=\mathbf{r}_{31}+\mathbf{r}_{42}$).

$2N_1 = 4$ копии о.с., причем исходный вектор I остается общим для всех копий (на середине отрезка I возникает центр симметрии и 4 копии о.с. связаны им попарно). В качестве пика N_2 выбираем также двукратный (не использованный ранее) пик в середине другой (не параллельной первой) стороны параллелограмма и осуществляем сдвиг по вектору II точек, уже выделенных по вектору I. Таким образом, на втором этапе вместо произвольных четырехугольников ([1]) мы обращаемся к параллелограмму (не смешивать с параллелограммом, описанным в ([2]), где последний возникает из-за $N_2 \equiv N_1$). При этом передвижении вдоль вектора II центр симметрии * из середины вектора I (рис. 3) — по элементарной теореме о произведении элемента (операции) симметрии на трансляцию — перемещается в центр «малого» параллелограмма со сторонами равными и параллельными векторам I и II, и тем самым эта операция выделяет сразу две копии ~~о.с.~~, причем точки в вершинах отмеченного «малого» параллелограмма будут общими для прямой и инвертированной копий о.с. (в силу центросимметричности параллелограмма). В этом — исключительность данного случая метода кратного (параллельного) пика ([2]). Задавая параллелограмм **, мы сразу получаем общую часть двух (левой и правой) о.с., причем неважно какой, так как выделяется центросимметричная часть о.с. (см. ([2])). Чтобы получить дискретную о.с., достаточно взять и добавить к нашему параллелограмму любую из двух (*5* или *5′* — рис. 4) точек, расположенных вне параллелограмма, но связанных инверсией в его центре. Вектора $\mathbf{r}_{51}$, $\mathbf{r}_{52}$, $\mathbf{r}_{53}$, $\mathbf{r}_{54}$ будут обязательно присутствовать в точечной в.с. Для каждой следующей точки, которую мы добавляем к копии о.с. из выделенных по N_1 и N_2 точек, проверяем наличие векторов между этой точкой и остальными точками о.с. В нашем примере (рис. 1—4) к точкам *1*—*5* можно добавить лишь точку *6*, но не точку *6′*, так как в в.с. мы находим вектора $\mathbf{r}_{56}$ и $\mathbf{r}_{65}$, но нет векторов $\mathbf{r}_{56'}$ и $\mathbf{r}_{6'5}$.

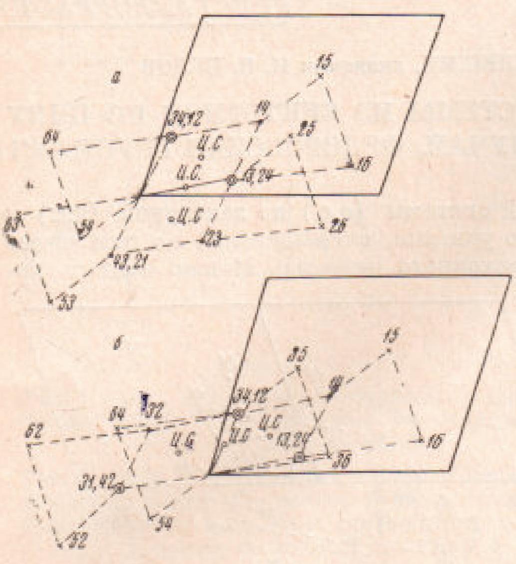


Рис. 3. Первый этап выделения о.с. из в.с. a — $N_1 = \mathbf{r}_{13}$ (I); $б$ — $N_1 = \mathbf{r}_{12}$ (II)

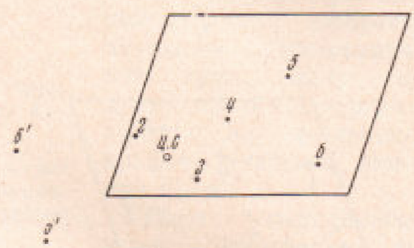


Рис. 4. Две копии о.с., выделенные по векторам N_1 (I) и N_2 (II) (или по N_1 (II) и N_2 (I))

* При обычной минимализации по двум единичным векторам обе выделяемых M_2 функции центросимметричны, но уже M_3 не обладает центром симметрии. В разбираемом алгоритме мы по вектору II сразу получаем M_4, однако центр симметрии сохраняется из-за специфики выбора векторов I и II.

** В общем случае для выделения наиболее очищенной копии о.с. ([1,2]) необходимо N_2 шагов последовательного объединения точек в многоугольники, последним из которых, фиксирующим лишь одну копию о.с., будет $(2+2N_2)$-угольник. При $N_2 = 2$, число четырехугольников будет $2!/(2-1)!1! = 2$, а шестиугольников $2!/0!2! = 1$. В предлагаемом алгоритме оба четырехугольника вырождаются в параллелограмм и совпадают друг с другом, делая тем самым излишним этап шестиугольников.

Только что описанный алгоритм иллюстрируется матричным (алгебраическим) описанием по Бюргеру [5]. Сохранив принятое выше обозначение точек о.с., имеем для в.с. матрицу

$$\begin{matrix} 11 & 12 & 13 & 14 & 15 & 16 \\ 21 & 22 & 23 & 24 & 25 & 26 \\ \vdots & & & & & \vdots \\ 61 & 62 & 63 & 64 & 65 & 66 \end{matrix} \qquad (2)$$

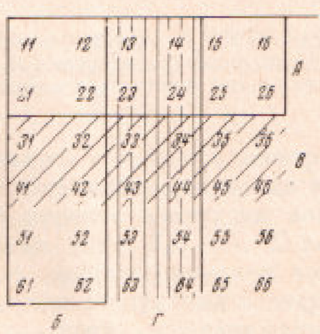
При условии равенства отрезков $\mathbf{r}_{12} \# \mathbf{r}_{34}$, сдвиг на вектор $\mathbf{r}_{12}$ демонстрируется

11	12	13	14	15	16
21	22	23	24	25	26
31	32	33	34	35	36
41	42	43	44	45	46
51	52	53	54	55	56
61	62	63	64	65	66

(3)

В случае двукратного пика выделяются 4 о.с.— 2 по отрезку $\mathbf{r}_{12}$ (выделены прямоугольником) и 2 по отрезку $\mathbf{r}_{34}$ (косая и вертикальная штриховка) (4). В этой четверке копий о.с. каждая пара (*А* и *Б*; *А* и *Г*; *Б* и *В*; *В* и *Г*) имеет общие точки (выписаны последними в (5) и (6); см. также рис. 3*б*). И кроме того у всех четырех копий — общий отрезок $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{34}$.

Поскольку в о.с. выполняется условие (1), то одинаково эффективно выделение и по вектору $\mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_{24}$, что отражается матрицей (7), аналогичной (4) (см. рис. 3*а*).



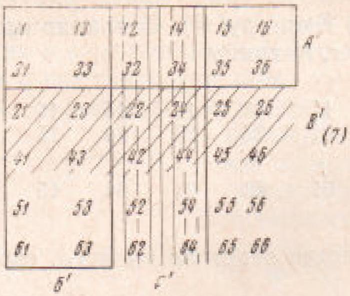
(4)

Здесь также выделяется две пары копий о.с. В каждой паре опять фиксируются 4 общих точки и по 2 собственные для каждой копии.

Последовательному сдвигу в.с. на вектор $\mathbf{r}_{12}$ (I) и затем на $\mathbf{r}_{13}$ (II) соответствует в матрицах наложение всех пар: (5), (6) (7) и (8)

$$\begin{matrix} 64 & 54 & 44 & 34 & 24 & 14 \\ 16 & 15 & 11 & 12 & 13 & 14 \end{matrix} \qquad (5)$$

$$\begin{matrix} 36 & 35 & 34 & 33 & 32 & 31 \\ 62 & 52 & 12 & 22 & 32 & 42 \end{matrix} \qquad (6)$$



$$\begin{matrix} 64 & 54 & 44 & 34 & 24 & 14 \\ 16 & 15 & 11 & 12 & 13 & 14 \end{matrix} \tag{8}$$

$$\begin{matrix} 63 & 53 & 43 & 33 & 23 & 13 \\ 26 & 25 & 21 & 22 & 23 & 24 \end{matrix} \tag{9}$$

при котором выделяются только совпадающие пары, т. е. 64, 54, 44, 34, 24, 14 и 16, 15, 11, 12, 13, 14 (10). Тем самым мы получаем две копии о.с. точек с общими точками $44 \equiv 11$, $34 \equiv 12$, $24 \equiv 13$, $14 \equiv 14$ — вершинами четырехугольника, причем в силу условия (1) этот последний всегда должен быть параллелограммом с присущим ему центром симметрии в его центре.

Горьковский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского

Институт кристаллографии
Академии наук СССР
Москва

Поступило
16 III 1970

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 182, 1067 (1968). [2] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 189, № 4 (1969). [3] Х. С. Мамедов, Н. В. Белов, ДАН, 106, 462 (1956). [4] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, Кристаллография, 14, 1059 (1969). [5] М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961.