

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

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

Алгоритм выделения основной системы (о.с.) из векторной (в.с.) по пику кратности два для общего случая ацентричного кристалла предложен в (1). Ниже рассмотрен случай centrosymmetric кристалла (федоровская группа $P1$).

Пусть centrosymmetric о.с. состоит из N точек (рис. 1, $N = 6$), образующих $N_1 = N/2$ пар; тогда в соответствующей в.с. все точки будут связаны в $N_1(N_1 - 1)/2$ параллелограммов, а максимальная кратность пика в.с. будет равна 2 (пик в середине стороны параллелограмма)* (рис. 2).

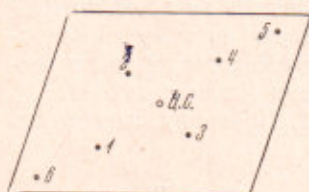


Рис. 1. О.с. из 6 точек. Федоровская группа $P1$

Выбираем в качестве исходного в в.с. любой пик, расположенный в середине стороны какого-либо параллелограмма, например $r_{12}(I)$. Система точек, выделенных по вектору I , приведена на рис. 3.

По сравнению с (1) на этом этапе выделяется лишь 2 копии о.с. точек**, связанных точкой инверсии в середине вектора I , при этом вектор r_{12} будет общим для этих двух копий. На втором этапе выделения за вектор II выбираем неиспользованный ранее также двукратный пик в середине дру-

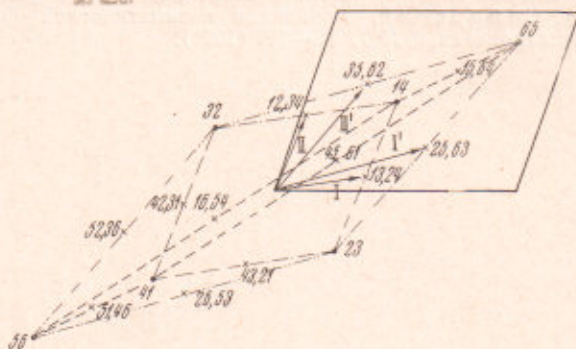


Рис. 2. В.с., соответствующая о.с. рис. 1. Выделены векторы I и II , I' и II'

гой стороны параллелограмма (рис. 2), и осуществляем сдвиг по нему среди точек, уже выделенных по вектору I . Фиксирующаяся на рис. 4 система точек и будет искомой.

Нетрудно убедиться, что в качестве исходного параллелограмма может быть взят любой из найденных в в.с. в процессе ее расшифровки. Два этапа выделения по векторам I' и II' (рис. 2, рис. 3б) приводят к той же о.с.

* Рассматривается случай, когда в независимой части о.с. нет пар точек n_1 и n_2 , m_1 и m_2 с $r_{m_1, m_2} = r_{n_1, n_2}$, ибо в силу centrosymmetricности основной системы в ней обязательно возникнут еще две пары \bar{m}_1 и \bar{m}_2 , \bar{n}_1 и \bar{n}_2 , и тем самым в в.с. будет пик кратности 4.

** В силу centrosymmetricности о.с.

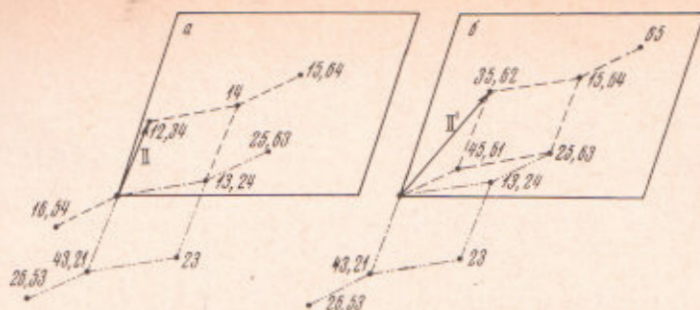


Рис. 3. Результат проявления в.с. по вектору I (a) и вектору I' (б)

В матричной форме записи по (2) для о.с. рис. 1 векторная система имеет вид

11	12	13	14	15	16
12	22	23	24	25	26
13	23	33	34	35	36
14	24	34	44	45	46
15	25	35	45	55	56
16	26	36	46	56	66

(1)

При выделении по вектору I 4 точки (1) просто попарно равны (выделены прямоугольником и косая штриховка)

11	12	13	14	15	16
12	22	23	24	25	26
13	23	33	34	35	36
14	24	34	44	45	46
15	25	35	45	55	56
16	26	36	46	56	66

(2)

и в результате выделяются лишь две системы

$$\begin{matrix} 11 & 12 & 13 & 14 & 15 & 16 & (=64 & 54 & 44 & 34 & 24 & 14 & \text{из } (1)) \\ 22 & 23 & 24 & 21 & 25 & 26 & (=63 & 53 & 43 & 33 & 23 & 13 & \text{из } (2)) \end{matrix} \quad (3)$$

с общими точками $11 = 22$ и $13 = 24$.

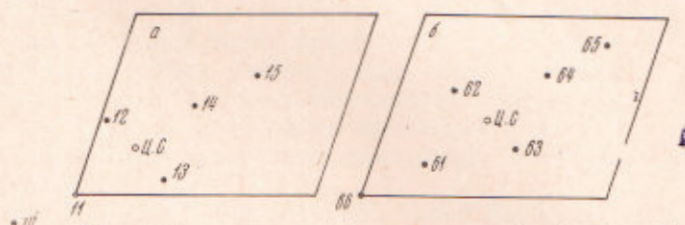


Рис. 4. О.с., выделенная по векторам I и II (I' и II')

Подобно тому как это было проделано в (4), при выделении по вектору II из в.с. проявляются

$$\begin{matrix} 11 & 12 & 13 & 14 & 15 & 16 & (=64 & 54 & 44 & 34 & 24 & 14 & \text{из } (2)), \\ 31 & 32 & 33 & 34 & 35 & 36 & (=62 & 52 & 42 & 32 & 22 & 12 & \text{из } (3)), \end{matrix} \quad (4)$$

Последовательный сдвиг в.с. на вектор I, затем на II в матричной записи сводится к наложению пар (3) и (4), после чего остается лишь одна система точек 11 12 13 14 15 16, которая и будет искомой.

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, 193, № 3 (1970). ² М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961.