Доклады Академии наук СССР
1971. Том 201, № 5

УДК 548.736 *КРИСТАЛЛОГРАФИЯ*

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

РАСШИФРОВКА ВЕКТОРНОЙ СИСТЕМЫ МЕТОДОМ ПАРАЛЛЕЛЬНОГО ВЕКТОРА ПО ПИКАМ ПРОИЗВОЛЬНОЙ КРАТНОСТИ ($n \geqslant 3$)

ФЕДОРОВСКАЯ ГРУППА P 1

В работах [1, 2] был рассмотрен алгоритм выделения основной системы (о.с.) из векторной (в.с.) при наличии в последней одного пика произвольной кратности ($n \geqslant 3$); в соответствующей о.с. из N точек $2n_1$ точек были объединены в n_1 пар, удовлетворяющих условию (1) и отстоящих друг от друга на неравные расстояния:

$$\mathbf{r}_{11'} = \mathbf{r}_{n_1 n_1'}. \tag{1}$$

Пусть в о.с. снято упомянутое ограничение, т. е. среди точек могут иметь место $2n_1, 2n_2, \ldots, 2n_i$ таких, которые наряду с «собственными» ($n_1, n_2, \ldots n_i$ парами) образуют еще и обобществленные пары, т. е. координаты точек о.с. подчиняются более общему условию (2) *

$$\mathbf{r}_{p_x p_x'} = \mathbf{r}_{p_x q_y}, \tag{2}$$

где p и q независимы и меняются от 1 до N; x и y независимы и пробегают значения от 1 до n_i. Каждая отдельная совокупность из n_i пар точек (например, n_1) о.с. порождает в в.с. n_i^2 линеек, параллельных вектору $\mathbf{r}_{n_i n_i'}$. n_i линеек из общего числа сливаются в одну, проходящую через начало, порождая на конце ее пик кратности n_i [3]. Следовательно, в полной в.с. будет присутствовать $n_1^2 + \ldots + n_i^2$ линеек, связанных с кратными пиками кратности $n_1 \ldots n_i$. Поскольку точки из одной совокупности (n_1) могут участвовать в образовании пар других совокупностей ($n_2, n_3, \ldots, n_i$), то часть из $n_1(n_1 - 1)$ линеек в общем положении также могут совпадать друг с другом, порождая естественно кратные пики, скажем, кратности m_1. Оговорим, что при этом указанные пары точек из совокупностей ($n_1 \ldots n_i$) не лежат на одной прямой и не отстоят друг от друга на расстояние, равное $|\mathbf{r}_{n_i n_i'}|$ или $2|\mathbf{r}_{n_i n_i'}|$, другими словами, пары точек в о.с. не образуют цепочек.

Введем обозначения: пик кратности n_s, соответствующий совокупности n_s пар из N точек о.с., будем обозначать $n_s(N)$; если же из совокупности n_s пар m_t пар ($t \neq s$) участвуют в образовании пар другой совокупности, например, n_r или, что то же самое, m_t пар из n_s равно отстоят друг от друга, то пик кратности m_t будем обозначать $m_t(n_s)$. В общем случае справедливо условие

$$n_s(N) \geqslant m_t(n_s) \text{ **};$$

* Условие (1) содержится в (2) как частный случай: $q = p'$, $x = y$; частным следует считать также случай, когда среди n_i пар точек внутри одной совокупности m пар равно отстоят друг от друга. Как и в [2], левую точку из пары обозначаем символом, правую — тем же символом, но со штрихом.

** При этом принимаем, что в образовании m_t пар участвуют лишь одноименные точки из пар совокупности n_s.

лишь когда одна совокупность n_r полностью содержится в n_s (т. е. в построении пар n_r участвуют лишь точки из множества пар n_s), и неравенство (3) переходит в

$$n_r(N) = m_t(n_s). \tag{4}$$

Перейдем (по рецепту ([2])) от полной в.с., соответствующей о.с. из N точек, к векторной подсистеме (в.п.), отвечающей основной подсистеме (о.п.) из n_s пар ($N \geqslant 2\ n_s$) точек; тогда при выполнении сформулированных условий, в.п. (n_s) включит в себя в $(N/n)^2$ раз меньше точек по сравнению с исходной в.с. Полученную в.п. (n_s) можно рассматривать как новую в.с. для о.с. из n_s точек — любых (но одноименных) концов пар из совокупности n_s. Если точки этого множества n_s образуют меж собой еще m_t пар *, то на в.п. (n_s) возникают тройки и кратные пики, отвечающие кратности m_t (обозначим $'m_t$). Так как о.п. n_s содержит лишь половину точек * (концы пар n_s), то возникающая кратность пика в в.с. равна $'m_t = m_t(n_s)/2$, а число линеек равно $('m_t)^2 = [m_t(n_s)]^2/4$. Если $m_t(n_s)$ содержится в $n_r(N)$, то на в.п. (n_s) сохраняются лишь тройки, отвечающие парам $'m_t(n_s)$; остальные $n_r(N) - 'm_t(n_s)$ троек исчезнут в процессе применения операции параллельного вектора.

Предположим, что кратность $'m_t$ оказалась большой, тогда внутри в.п. (n_s) повторяем операцию выделения концов линеек и переходим к в.п. $['m_t(n_s)]$. Принимая ее за новую в.с. основной подсистемы $l_a('m_t)$, разыскиваем (методом параллельного вектора) $('l^a)^2$ линеек и пик кратности $'l_a$, для которых выполняется условие $'l_a = l_a('m_t)/2$. Очевидно, что здесь также справедливы (3) и (4), т. е.

$$l_a('m_t) \leqslant m_t(n_s) \leqslant n_r(N). \tag{5}$$

В этом случае число точек в в.п. ($'m_t$) сократится по сравнению с предыдущей в.п. в $(n_s/'m_t)^2$ раз, а по сравнению с исходной в.с. в $(N/n_s)^2 \cdot$ $\cdot (n_s/'m_t)^2$ раз.

Поскольку каждая последующая о.п. содержится в предыдущей, то для кратности пиков, выделяемых при повторных операциях (параллельным вектором), справедливо условие

$$n_s \geqslant m_t \geqslant l_a \quad \text{и т. д.} \tag{6}$$

а так как при переходе от о.с. к о.п. остается лишь половина точек (из каждого множества пар, см. выше), то в каждой следующей в.п. кратность пика понижается по меньшей мере вдвое по сравнению с предыдущей в.с. ($'m_t = m_{t/2}$; $'l_a = l_{a/2}$ и т. д.).

Таким образом, подчеркнем еще раз следующее: если $2\,n_s$ точек исходной о.с. образуют, помимо множества n_s пар, еще m_t, l_a и т. д. (в отмеченном выше смысле) пар, то при любой кратности n_s, кратности пиков m_t, l_a и т. д. будут только четными.

Отмеченные выше особенности в.с. (и в.п.) при наличии в ней нескольких пиков произвольной кратности позволяют предложить алгоритм для ее расшифровки.

Пусть в исходной в.с. имеют место несколько пиков произвольной кратности $n_1 \ldots n_s \ldots n_i$. Возьмем за первоначальный вектор сдвига любой из них, например, самый мощный — кратности n_s. Выделим в.п. (n_s) — концы линеек, параллельных $\mathbf{r}_{n_s n'_s}$. Оперируем далее с в.п. (n_s), рассматривая ее как в.с. Выделяем в ней концы линеек, параллельных вектору $\mathbf{r}_{m_t m'_t} = \mathbf{r}_{n_t n'_t}$, и переходим к в.п. $\{'m_t(n_s)\}$. Продолжаем этот процесс перехода (методом параллельного вектора) до тех пор, пока в соответствующей $\{$в.п.$\}_{k+s}$ останется лишь одна точка. Вычитая последовательно из этой точки $\{$о.пс.$\}_k$ все векторы, по которым мы переходим от исходной в.с. к $\{$в.п.$\}_{k+s}$, т. е. $-\mathbf{r}_{n_{s+k-1},\, n'_{k+s-1}}, \ldots, -\mathbf{r}_{n_s n'_s}$, мы получаем 2^{kL_2} одинаковых параллелограмма. Разыскивая совокупность параллелограммов в исходной в.с., мы получим две копии о.с. Переход к единственной осуществляем по рецептам ([4], [5]) путем подключения любой точки (к выделяемому многоугольнику), не входящей в совокупность из $2\,n_{(k+s-1)}$ параллелограммов.

Авторы выражают благодарность В. Н. Биюшкину за участие в обсуждении результатов.

Горьковский исследовательский физико-технический институт
Институт кристаллографии
Академии наук СССР
Москва

Поступило
9 VII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 195, 831 (1970). [2] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ЖСХ, 12, № 4 (1971). [3] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ЖСХ, 11, 943 (1970). [4] М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961. [5] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 193, № 3 (1970).