Доклады Академии наук СССР
1971. Том 201, № 6

УДК 548.736 КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

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

ВЫДЕЛЕНИЕ ОСНОВНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ ВЕКТОРНОЙ ПРИ НАЛИЧИИ В ОСНОВНОЙ СИСТЕМЕ НЕСКОЛЬКИХ ОДИНАКОВЫХ ИЛИ ИНВЕРТИРОВАННЫХ k-(МНОГО)-УГОЛЬНИКОВ.

ОБЩИЙ СЛУЧАЙ, ФЕДОРОВСКАЯ ГРУППА $P\,1$

Пусть в векторной системе (в.с.), соответствующей основной (о.с.) из N точек, отыскан k-угольник, отвечающий взаимному расположению k точек, о.с., $j_1j_2\ldots j_k$ *. Зададим указанный многоугольник радиус-векторами от одной из его вершин (например, точка j_1) до остальных: $\mathbf{r}_{j_1j_2}, \mathbf{r}_{j_1j_3},\ldots,\mathbf{r}_{j_1j_k}$. Если по этим векторам построить функцию минимализации k-го ранга (M_k), то, согласно ([1], [2]), на ней выделится такая (любая) точка mn, которая является вершиной многоугольника, инвертированного исходному, причем она соответствует вершине j_1 исходного k-угольника:

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{j_1j_2}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{p_2q_2},\\ \mathbf{r}_{j_1j_3}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{p_3q_3},\\ &\ldots\ldots\ldots\\ \mathbf{r}_{j_1j_k}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{p_kq_k}.\end{aligned}\tag{1}$$

А. Пусть в о.с. из N точек имеет место точно такой же многоугольник, образованный точками $i_1\ldots i_k$, т. е. выполняется условие

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{j_1j_2}&=\mathbf{r}_{i_1i_2},\\ &\ldots\ldots\\ \mathbf{r}_{j_1j_k}&=\mathbf{r}_{i_1i_k}.\end{aligned}\tag{2}$$

Тогда условие выделения какой-либо точки mn определяется при совместном решении обеих систем (1) и (2).

Преобразуем систему (2), для чего к левой и правой частям каждого уравнения из (2) прибавим по нулевому вектору $\mathbf{r}_{x_kx_k}$ и $\mathbf{r}_{y_ky_k}$, где x_k и y_k — любая точка из N точек о.с.

$$\begin{gathered}\mathbf{r}_{j_1j_k}=\mathbf{r}_{j_1j_k}+\mathbf{r}_{x_kx_k}=\mathbf{r}_{i_1i_k}+\mathbf{r}_{y_ky_k},\\ \mathbf{r}_{j_1j_k}+\mathbf{r}_{x_kx_k}=\mathbf{r}_{j_k}-\mathbf{r}_{j_1}+\mathbf{r}_{x_k}-\mathbf{r}_{x_k}=(\mathbf{r}_{j_k}-\mathbf{r}_{x_k})-(\mathbf{r}_{j_1}-\mathbf{r}_{x_k})=\\ =(\mathbf{r}_{x_k}-\mathbf{r}_{j_1})-(\mathbf{r}_{x_k}-\mathbf{r}_{j_k})=\mathbf{r}_{x_kj_k}-\mathbf{r}_{x_kj_1}=\mathbf{r}_{j_1x_k}-\mathbf{r}_{j_kx_k},\\ \mathbf{r}_{i_1i_k}+\mathbf{r}_{y_ky_k}=\mathbf{r}_{y_ki_k}-\mathbf{r}_{y_ki_1}=\mathbf{r}_{i_1y_k}-\mathbf{r}_{i_ky_k}.\end{gathered}\tag{3}$$

В результате преобразований система (2) переходит в

$$\begin{gathered}\mathbf{r}_{j_1j_2}=\mathbf{r}_{x_2j_2}-\mathbf{r}_{x_2j_1}=\mathbf{r}_{j_1x_2}-\mathbf{r}_{j_2x_2}=\mathbf{r}_{y_2i_2}-\mathbf{r}_{y_2i_1}=\mathbf{r}_{i_1y_2}-\mathbf{r}_{i_2y_2},\\ \ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\ldots\\ \mathbf{r}_{j_1j_k}=\mathbf{r}_{x_kj_k}-\mathbf{r}_{x_kj_1}=\mathbf{r}_{j_1x_k}-\mathbf{r}_{j_kx_k}=\mathbf{r}_{y_ki_k}-\mathbf{r}_{y_ki_1}=\mathbf{r}_{i_1y_k}-\mathbf{r}_{i_ky_k}.\end{gathered}\tag{4}$$

* С помощью метода тяжелого атома или из кристаллохимических соображений или из-за симметрии федоровской группы.

Сравним (1) и (4). Условие выделения точки mn сводится к равенству элементов из всех столбцов матрицы

$$\begin{pmatrix} x_2j_2 & j_1x_2 & y_2i_2 & i_1y_2 \\ x_3j_3 & j_1x_3 & y_3i_3 & i_1y_3 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_kj_k & j_1x_k & y_ki_k & i_1y_k \end{pmatrix}. \tag{5}$$

Полагая координаты точек i_k и j_k независимыми и учитывая, что x и y, как любые точки о.с. могут быть взаимно заменяемыми, получаем во всех столбцах матрицы (5) либо элемент j_1X, либо i_1X *, т. е. выделяются две копии о.с.: одна — изображение о.с. в точке j_1, другая — в точке i_1. При этом вторая копия смещена относительно первой на вектор $\mathbf{r}_{i_1j_1}$.

Б. В о.с. из N точек, точки $i_1 \ldots i_k$ образуют k-угольник, инвертированный исходному $(j_1 \ldots j_k)$, т. е. условие (2) заменяется условием

$$\begin{gathered} \mathbf{r}_{j_1j_2} = \mathbf{r}_{i_2i_1}, \\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot\ \cdot \\ \mathbf{r}_{j_1j_k} = \mathbf{r}_{i_ki_1}. \end{gathered} \tag{6}$$

Проделав преобразования с каждым уравнением из (6), подобные приведенным выше (3) и (4), формируем матрицу, аналогичную матрице (5):

$$\begin{pmatrix} x_2j_2 & j_1x_2 & y_2i_1 & i_2y_2 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ x_kj_k & j_1x_k & y_ki_1 & i_ky_k \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Условие выделения точки mn сохраняется таким же, как и в случае А: равенство элементов всех столбцов матрицы (7). Здесь также выделяются две копии о.с.: j_1X и Xi_1. Одна — отображение о.с. в точке j_1, вторая копия (Xi_1) получена из первой, если отобразить ее в точке i_1 и сместить на $\mathbf{r}_{j_1i_1}$.

В. Полученные выше результаты легко можно обобщить на случай, когда в о.с. присутствуют n многоугольников равных или n — инвертированных исходному k-угольнику.

Пусть в о.с. есть n k-угольников, равных исходному (на языке матрицы (5) это приведет к увеличению в ней числа столбцов до $2n$). Построим в соответствующей в.с. функцию минимализации по любому из n k-угольников. На ней, в согласии с разобранным случаем А, выделяются n копий о.с., смещенных одна относительно другой. Для оставления единственной копии необходимо в в.с. найти хотя бы еще один такой k-угольник **. Это нетрудно осуществить с помощью уже ставшей привычной процедуры параллельного вектора ([3]): все необходимые точки лежат на линейках, параллельных $r_{j_1j_k}$***; они соответствуют векторам сдвига, на которые нужно сместить M_k, чтобы выделить единственную копию о.с.

При наличии в основной системе n многоугольников, инвертированных исходному, возрастает (до $2n$) число столбцов матрицы (7). Процедура выделения единственной копии (из $n+1$ копий) полностью аналогична только что описанной.

Г. Наиболее общим следует считать случай, когда в о.с. есть n_1 равных и n_2 инвертированных k-угольников.

На соответствующей функции минимализации M_k, построенной по любому из n_1 k-угольников выделяется n_1 копий о. с., взаимно смещенных

* X — обобщенный символ произвольной точки о.с.

** Строго говоря, достаточно одной точки, лишь бы в о.с. не было такого же $(k+1)$-угольника или ему инвертированного. Удобнее вместо точки брать в в.с. такой же k-угольник, так как подсоединение его заведомо выделит одну о.с.

*** Тот же результат получаем, построив повторную функцию минимализации M_k по уже имеющейся функции M_k, т. е. функцию $'M = \min\{M_k(k\text{-уг.}),\ M_k(k\text{-уг.})\}$.

$\mathbf{r}_{j_1 j_m}$ $(m = 1, 2, \ldots, n_1 - 1)$ и обусловленных наличием n_1 равных многоугольников, плюс n_2 копий, обусловленных наличием n_2 инвертированных k-угольников, плюс $2n_1n_2$ взаимных копий. Из общего числа $n_1 + 2n_1n_2 + n_2$ независимых копий будет $n_1 + n_2$, остальные совпадают с ними.

Не уменьшая общности, доказательство проведем для случая, когда в о.с. имеют место 2 равных и 1 инвертированный k-угольник, что записывается (через матрицы) следующим образом: равенство k-угольников $(j_1 \ldots j_k)$ и $(i_1 \ldots i_k)$ выражается системой (2), а условия существования в о.с. многоугольника $(l_1 \ldots l_k)$, инвертированного двум первым, системами (8) и (9), аналогичными системе (6):

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_{j_1 j_2} = \mathbf{r}_{l_2 l_1}, \\ &\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ &\mathbf{r}_{j_1 j_k} = \mathbf{r}_{l_k l_1}; \end{aligned} \tag{8}$$

$$\begin{aligned} &\mathbf{r}_{i_1 i_2} = \mathbf{r}_{l_2 l_1}, \\ &\cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \quad \cdot \\ &\mathbf{r}_{i_1 i_k} = \mathbf{r}_{l_k l_1}. \end{aligned} \tag{9}$$

Проделав с каждой строкой (2), (8) и (9) преобразования (3), приходим к матрице с шестью столбцами:

$$\begin{pmatrix} x_2 j_2 & j_1 x_2 & y_2 i_2 & i_1 y_2 & z_2 l_1 & l_2 z_2 \\ \vdots & & & & & \\ x_k j_k & j_1 x_k & y_k i_k & i_1 y_k & z_k l_1 & l_k z_k \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Полагая координаты точек (как и ранее, в случае А) независимыми и учитывая взаимозаменяемость точек X, Y, Z, получаем, что выделяются три копии о.с.: j_1X, i_1Y, Zl_1. При n_1 прямых и n_2 инвертированных k-угольников число столбцов матрицы становится равным $2n_1 + 2n_2$, и процедура выделения приводит к $n_1 + n_2$ копиям о.с.

В заключение авторы пользуются случаем, чтобы выразить благодарность В. П. Головачеву и А. В. Никитину за участие в обсуждении результатов.

Горьковский исследовательский
физико-технический институт

Поступило
9 VII 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961. [2] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 196, № 5 (1971). [3] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ЖСХ, 11, 943 (1970).