

В. И. БУРДИНА

**СИММЕТРИЯ ФУНКЦИИ ВРАЩЕНИЯ
В ПРЕДСТАВЛЕНИИ КВАТЕРНИОНАМИ**

(Представлено академиком Н. В. Беловым 18 X 1971)

Задача выделения примитивных областей многообразия вращений по группам «симметрии», представляющим прямые произведения $G_1 \times G_2$ групп вращений G_1 и G_2 межатомных функций P_1 и P_2 , возникает при определении ориентации отдельных субъединиц молекулярных кристаллов с использованием функции вращения (¹).

Описание вращений тремя эйлеровыми углами, принятое в (¹), хорошо согласуясь с размерностью многообразия вращений, в отдельных случаях приводит к трудно обозримым нелинейным соотношениям. Линейное во всех случаях изображение вращений ортогональных (3×3) -матрицами (²) не может обойтись без эйлеровых углов при скапировании областей вращений. Приводимое представление вращений кватернионами (³), перенося рассмотрение в четырехмерное евклидово пространство, делает возможным использование аппарата теории правильных разбиений сферы (⁴). Эти рассуждения в конечном итоге позволяют ограничиться наиболее естественным представлением вращений осью и углом поворота.

1. Пусть S и T — принадлежащие точечным группам G_1 и G_2 вращения межатомных функций P_1 и P_2 . Легко видеть, что произвольное вращение ρ и вращение

$$\rho' = S\rho T \quad (1)$$

переводят P_2 в одно и то же по отношению к P_1 расположение, т. е. вращения ρ и ρ' эквивалентны. «Симметрия» (1) описывается элементом $S \times T$ прямого произведения $G_1 \times G_2$ групп G_1 и G_2 (²).

Вращению ρ , характеризуемому направлением оси l и углом поворота ω , сопоставим (^{3, 5}) единичный кватернион

$$u = \cos \frac{1}{2}\omega + (l_1i + l_2j + l_3k) \sin \frac{1}{2}\omega; \quad (2)$$

здесь l_1, l_2 и l_3 — декартовы координаты единичного вектора l . Легко видеть, что отличающиеся только знаком кватернионы u и $-u$ представляют одно и то же вращение, поскольку повороты на углы ω и $2\pi - \omega$ по отношению к противоположным направлениям l и $-l$ совпадают. Принимая во внимание равенства $i^2 = j^2 = k^2 = -1$, $ij = -ji = k$, $jk = -kj = i$ и $ki = -ik = j$, можно убедиться, что произведению $\rho_1\rho_2$ вращений отвечает произведение u_1u_2 кватернионов и, таким образом, имеет место гомеоморфизм группы вращений и единичной трехмерной сферы S^3 кватернионов

$$|u|^2 = u_0^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 = 1 \quad (3)$$

с идентифицированными диаметральными точками; последнее равносильно присутствию центра инверсии в начале координат.

Преобразованию (1) отвечает такое же преобразование кватернионов

$$u' = sut, \quad (4)$$

где $s = s_0 + s_1i + s_2j + s_3k$, $t = t_0 + t_1i + t_2j + t_3k$ — кватернионы поворотов S и T , $u' = u_0 + u_1'i + u_2'j + u_3'k$, $u = u_0 + u_1i + u_2j + u_3k$ — произвольный кватернион.

Используя линейность (4) по u и переходя к покомпонентной форме записи, можно представить левое и правое преобразования $u' = su$ и $u'' = tu$ в матрично-векторной форме:

$$u' = Su, \quad u'' = Tu, \quad (5)$$

$$S = \begin{pmatrix} s_0 & -s_1 & -s_2 & s_3 \\ s_1 & s_0 & -s_3 & s_2 \\ s_2 & s_3 & s_0 & -s_1 \\ s_3 & -s_2 & s_1 & s_0 \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} t_0 & -t_1 & -t_2 & -t_3 \\ t_1 & t_0 & t_3 & -t_2 \\ t_2 & -t_3 & t_0 & t_1 \\ t_3 & t_2 & -t_1 & t_0 \end{pmatrix}.$$

Общее преобразование (4) запишется в виде

$$u' = Zu,$$

где (4×4) -матрица Z равна произведению матриц S и T в произвольном порядке:

$$Z = ST = TS.$$

Таким образом, элементу $S \times T$ прямого произведения $G_1 \times G_2$ в кватернионном представлении отвечает произведение коммутирующих между собой матриц S и T . Прямое произведение сводится к простому произведению матричных представлений $\{S\}$ и $\{T\}$ групп вращений.

Т а б л и ц а 1

Преобразования вращений в представлении кватернионами

Ось вращения	Направление	$u' = su$	$u' = us$
2	001	$\pm (-u_3, -u_2, u_1, u_0)$	$\pm (-u_3, u_2, -u_1, u_0)$
	010	$\pm (-u_2, u_3, u_0, -u_1)$	$\pm (-u_2, -u_3, u_0, +u_1)$
	100	$\pm (-u_1, u_0, -u_3, u_2)$	$\pm (-u_1, u_0, u_3, -u_2)$
4	001	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_3, u_1 - u_2, u_1 + u_2, u_0 + u_3)$	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_3, u_1 + u_2, -u_1 + u_2, u_0 + u_3)$
	010	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_2, u_1 + u_3, u_0 + u_2, -u_1 + u_3)$	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_2, u_1 - u_3, u_0 + u_2, u_1 + u_3)$
	100	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_1, u_0 + u_1, u_2 - u_3, u_2 + u_3)$	$\pm \frac{\sqrt{2}}{2} (u_0 - u_1, u_0 + u_1, u_2 + u_3, -u_2 + u_3)$
3	001	$\pm \frac{1}{2} (u_0 - \sqrt{3} u_3, u_1 - \sqrt{3} u_2, \sqrt{3} u_1 + u_2, \sqrt{3} u_0 + u_3)$	$\pm \frac{1}{2} (u_0 - \sqrt{3} u_3, u_1 + \sqrt{3} u_2, -\sqrt{3} u_1 + u_2, \sqrt{3} u_0 + u_3)$
6	001	$\pm \frac{1}{2} (\sqrt{3} u_0 - u_3, \sqrt{3} u_1 - u_2, \sqrt{3} u_2 + u_1, \sqrt{3} u_3 + u_0)$	$\pm \frac{1}{2} (\sqrt{3} u_0 - u_3, \sqrt{3} u_1 + u_2, \sqrt{3} u_2 - u_1, \sqrt{3} u_3 + u_0)$
3	111	$\pm \frac{1}{2} (u_0 - u_1 - u_2 - u_3, u_0 + u_1 - u_2 + u_3, u_0 + u_1 + u_2 - u_3, u_0 - u_1 + u_2 + u_3)$	$\pm (u_0 - u_1 - u_2 - u_3, u_0 + u_1 + u_2 + u_3, u_0 - u_1 + u_2 + u_3, u_0 + u_1 - u_2 + u_3)$

2. В табл. 1 описаны левые и правые преобразования (5) для основных кристаллографических осей 2_{001} , 2_{010} , 2_{100} , 4_{001} , 4_{010} , 4_{100} , 3_{001} , 6_{001} и 3_{111} . Нижние индексы указывают направление оси в декартовой системе координат. Допустимая установка кристаллографических осей показана на рис. 1. Каждое преобразование описано координатами точки, эквивалентной произвольной точке $u = (u_0, u_1, u_2, u_3)$. Преобразования вертикальных осей 2_{001} , 4_{001} , 3_{001} и 6_{001} действуют в координатах u_0, u_3 и u_1, u_2 как вращения на вдвое меньший угол поворота. Левые и правые преобразования отличаются направлением вращений в координатах u_1, u_2 . Другие оси действуют аналогичным образом. Именно, в координатах u_1, u_2, u_3 перпендикулярно направлению оси имеет место вращение на вдвое

меньший угол поворота (различный по знаку для левых и правых преобразований); точно такому же преобразованию подвергаются координаты двумерного ортогонального подпространства, образованного осью вращения и направлением u_0 .

Так, в случае тройной оси 3_{111} разности $u_1 - u_2$, $u_2 - u_3$ и $u_3 - u_1$, равные скалярным произведениям вектора u и векторов $e_{12} = e_1 - e_2$, $e_{23} = e_2 - e_3$ и $e_{31} = e_3 - e_1$ (рис. 2), подвергаются круговой перестановке с изменением знаков:

$$\begin{aligned} u'_1 - u'_2 &= -(u_2 - u_3), & u'_2 - u'_3 &= -(u_3 - u_1), \\ u'_3 - u'_1 &= -(u_1 - u_2), \end{aligned}$$

поэтому в плоскости векторов e_{12} , e_{23} и e_{31} , ортогональной оси 111 , действует вращение на угол $1/3\pi$. Легко убедиться, что $u_{111} = (u_1 + u_2 + u_3) / \sqrt{3}$ (проекция на ось 111) и u_0 преобразуется по формулам

$$u'_0 = 1/2 u_0 - (\sqrt{3}/2) u_{111}, \quad u'_{111} = (\sqrt{3}/2) u_0 + 1/2 u_{111},$$

также описывающим поворот на угол $1/2\pi$.

Преобразование общего вида $u' = sus^{-1}$, где s^{-1} — кватернион обратного преобразования, называемое автоморфизмом, действует как вращение S в координатном пространстве u_1, u_2, u_3 .

В качестве примера рассмотрим группу $\{432\} \times \{23\}$. Используя левые преобразования осей 4_{001} , 4_{010} и 4_{100} , можно добиться, чтобы в произвольной точке $u = (u_0, u_1, u_2, u_3)$ координата u_0 стала положительной и максимальной по модулю среди координат эквивалентных точек. Последнее равносильно переводу точки (u_0, u_i) , содержащей наибольшую по модулю координату, в минимальную область и выполнению неравенств

$$\begin{aligned} |u_i| &\leq (\sqrt{2} - 1)u_0, & i &= 1, 2, 3, \\ |u_1| + |u_2| + |u_3| &\leq u_0. \end{aligned} \quad (6)$$

Комбинируя далее преобразования правой группы $\{23\}$ с одноименными обратными преобразованиями левой группы, получаем вращения 3 и 2, сводящиеся к круговым перестановкам координат u_1, u_2, u_3 и к изменению знаков двух координат. Используя эти преобразования, можно сделать u_3 наименьшей по модулю среди u_1, u_2, u_3 и u_1 одновременно с u_2 неотрицательными, т. е.

$$0 \leq u_3 \leq u_2, \quad 0 \leq u_3 \leq |u_1|. \quad (7)$$

Последние неравенства выделяют внутри единичной сферы

$$u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 = 1 \quad (8)$$

секториальную область, примыкающую к $1/12$ сферы. Ранее полученное условие (8) включает u_0 и в конечном счете сводится к ограничению

$$\omega \leq 2 \arctg \min \left(\frac{\sqrt{2} - 1}{|l_i|}, \frac{1}{|l_1| + |l_2| + |l_3|}; i = 1, 2, 3 \right).$$

3. Возможность задания примитивных областей в форме секториальных в каждом конкретном случае ясна из общего метода (4) построения фундаментальных областей на сфере.

Сканирование областей удобно вести, выбирая сначала узел равномерной сети точек на сфере (8), что равносильно выбору направления l

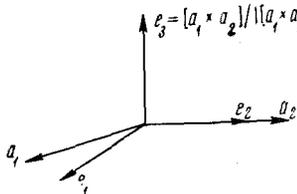


Рис. 1

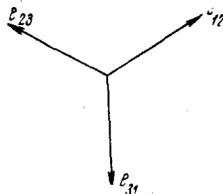


Рис. 2

оси вращения, затем проходя узлы вдоль радиуса, что соответствует изменению угла поворота ω . Равномерному распределению узлов внутри и на границе сферы (8) должен отвечать постоянный в смысле метрики вращений элемент объема, инвариантный при преобразовании симметрии (1). Подобная метрика, определяемая в малом единственным образом (^{3, 5, 6}), совпадает с метрикой кватернионов. Для точек сфер единичного и произвольного радиусов координата u_0 постоянна, поэтому «расстояние» между точками сферы в смысле кватернионов будет совпадать с обычным расстоянием. При построении равномерных сеток векторов l на S^2 удобно использовать карты сферических сеток в полярных координатах

$$u_1 = r \sin \psi \cos \varphi, \quad u_2 = r \sin \psi \sin \varphi,$$

$$u_3 = r \cos \psi.$$

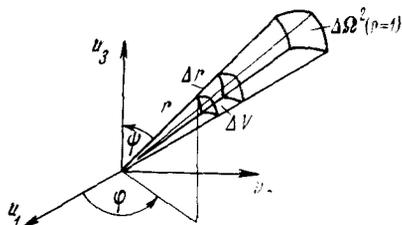


Рис. 3

Смещению Δr вдоль оси вращения отвечает «расстояние» $|\Delta u| = |\Delta(\cos^{1/2}\omega + l \sin^{1/2}\omega)| = 1/2\Delta\omega$, равное половине изменения угла поворота и отличающееся от обычного $\Delta r = \cos^{1/2}\omega \cdot (1/2\Delta\omega)$ коэффициентом подобия $\cos^{1/2}\omega$.

Элемент ΔV секториального объема (рис. 3) определится величиной

$$\Delta\Omega^3 = \frac{\Delta V}{\cos^{1/2}\omega} = 1/2\Delta\omega r^2 \Delta\Omega^2,$$

где $\Delta\Omega^2$ — элемент поверхности единичной сферы S^2 . Отсюда

$$\Delta\omega = \frac{4}{1 - \cos \omega} \frac{\Delta\Omega^2}{\Delta\Omega^3}.$$

Таким образом, шаг $\Delta\omega$ равномерной сети вращений зависит от ω нелинейным образом.

Если скоро узел l , ω равномерной сети вращений определен, может быть вычислена матрица вращения R в декартовой системе координат (⁷)

$$R = \cos \omega \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} + \sin \omega \begin{pmatrix} 0 & -l_3 & l_2 \\ l_3 & 0 & -l_2 \\ -l_2 & l_1 & 0 \end{pmatrix} + (1 - \cos \omega) \begin{pmatrix} l_1^2 & l_1 l_2 & l_1 l_3 \\ l_1 l_2 & l_2^2 & l_2 l_3 \\ l_1 l_3 & l_2 l_3 & l_3^2 \end{pmatrix}.$$

Целесообразность изложенных рассмотрений стала очевидной после проведения пробных расчетов функции вращения на ЭВМ и бесед с математиками и кристаллографами Б. Н. Делоне, В. И. Хитровой и другими, которым автор выражает свою признательность.

Институт кристаллографии
Академии наук СССР
Москва

Поступило
29 IX 1971

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ P. Tollin, P. Main, M. G. Rossmann, Acta crystallogr., 20, 404 (1966).
² В. И. Бурдина, Кристаллография, 15, 4, 623 (1970). ³ Л. С. Понрягин, Непрерывные группы, М., 1954, стр. 197, 369. ⁴ Б. Н. Делоне, Н. И. Сандакова, Тр. Матем. инст. АН СССР им. В. А. Стеклова, 14, 28 (1961). ⁵ Д. П. Желобенко, Компактные группы Ли и их представления, М., 1970, стр. 58. ⁶ Ф. Мурнаган, Теория представлений групп, ИЛ, 1950, стр. 302, 319. ⁷ International Tables for X-ray Crystallography, 2, Birmingham, 1959, p. 63.