Доклады Академии наук СССР
1972. Том 205, № 2

УДК 548.736 *КРИСТАЛЛОГРАФИЯ*

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

О ДОПОЛНЕНИИ БЮРГЕРОВСКОГО АЛГОРИТМА ВЫДЕЛЕНИЯ ОСНОВНОЙ СИСТЕМЫ ИЗ ВЕКТОРНОЙ

Условие разложения (до конца) векторной системы (в.с.) было сформулировано в работах ([1], [2]) и в аналитической форме — в ([3]). На первом этапе соответствующего алгоритма используется центросимметричный проявитель — отрезок, и если центр симметрии отрезка совпадает с кристаллографическим, то на функции выделения (M_2) фиксируется одна основная система (о.с.). В противном случае получаются две копии, связанные центром симметрии отрезка — проявителя. Для перехода к единственной копии (т. е., чтобы избавиться от дополнительного центра симметрии) Бюргер предложил добавить к первоначальному отрезку точку, т. е. повысить до трех ранг выделяющего многоугольника (на единицу). Этот же рецепт остается в силе, и когда выделяющий отрезок оказывается n-кратным. Если добавляемая точка сама имеет кратность n_1, то возникают ложные точки (помимо копии о.с.).

Доказательство проведем сначала для случая двух одинаковых k-угольников. Пусть в о.с. из N точек можно выделить два одинаковых k-угольника: 1, 2, 3, . . . , k и 1′, 2′, 3′, . . . , k', т. е. выполняется условие

$$\begin{aligned} \mathbf{r}_{12} &= \mathbf{r}_{1'2'}, \\ \mathbf{r}_{13} &= \mathbf{r}_{1'3'} \\ &\dots\dots\dots \\ \mathbf{r}_{1k} &= \mathbf{r}_{1'k'}. \end{aligned} \tag{1}$$

Кроме того, пусть для любых других точек имеет место

$$\mathbf{r}_{1Q} = \mathbf{r}_{ml} \tag{2}$$

при $m \neq 1'$. Тогда на функции выделения M_{k+1} (по k-угольнику и вектору $\mathbf{r}_{1Q}$) остаются точки, которые удовлетворяют условию (3), записываемому в матричной форме (см. ([4])):

$$\begin{pmatrix} 1X & X2 & 1'X & X2' \\ 1X & X3 & 1'X & X3' \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ 1X & Xk & 1'X & Xk' \\ 1X & XQ & mX & Xl \end{pmatrix}, \tag{3}$$

т. е. выделяется одна копия о.с. — $1X$ (изображение в т. 1) плюс дополнительные точки $1'Q$ и $1'l$ ([4]). Доказанная теорема легко обобщается на случай, когда часть точек о.с. образует n_1 одинаковых многоугольников (каждая строка в уравнении (1) содержит n_1 составляющих: $\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{1'2'} = \mathbf{r}_{1''2''} = \dots = \mathbf{r}_{1^{n_1}2^{n_1}}$ и т. д.) плюс n_2 пар, удовлетворяющих условию (2) (индекс l в (2) меняется от l_1 до n_2). В этом случае на M_{k+1} помимо копии о.с. присутствует еще n_2 ($n_1 - 1$) ложных точек, что и отражается матрицей

$$\begin{pmatrix} 1' & 1'' & 1''' \dots 1^{n_1} \\ Q & l_1 & l_2 \dots l_{n_2} \end{pmatrix}. \tag{4}$$

Положения этих дополнительных точек легко находятся по рецепту параллельного вектора ([5]). Если в о.с. из N точек часть точек объединена в два инвертированных k-угольника $1, 2, 3, \ldots, k$ и $1', 2', 3', \ldots, k'$ (см. (5)) и в две пары, подчиняющиеся условию (6):

$$\begin{gathered} \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{2'1'}, \\ \mathbf{r}_{13} = \mathbf{r}_{3'1'}, \\ \cdots\cdots\cdots \\ \mathbf{r}_{1k} = \mathbf{r}_{k'1'}. \end{gathered} \tag{5}$$

$$\mathbf{r}_{1Q} = \mathbf{r}_{pl}, \quad Q \neq 1', \quad l \neq 1', \tag{6}$$

то на M_{k+1} соответственно выделяется одна копия о.с. ($1X$) плюс дополнительная точка ($p1'$) в полном соответствии с матрицей

$$\begin{pmatrix} 1X & X2 & 2'X & X1' \\ 1X & X3 & 3'X & X1' \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1X & Xk & k'X & X1' \\ 1X & XQ & pX & Xl \end{pmatrix}. \tag{7}$$

Полученный результат легко распространить на о.с., в которой можно выделить один k-угольник $(1, 2, \ldots, k)$ и n_1, ему инвертированных ($1', 2', \ldots, k'$; $1^{n_1}, \ldots, k^{n_1}$), плюс n_2 пар точек, подчиняющихся условию (6). В этой ситуации на M_{k+1} возникает n_1 $(n_2 - 1)$ дополнительных точек. Все они находятся из условий

$$\begin{pmatrix} p_1 & p_2 & \ldots & p_{n_2-1} \\ 1' & 1'' & \ldots & 1^{n_1} \end{pmatrix}. \tag{8}$$

В самом общем случае, когда в о.с. имеют место n_1 прямых, n_2 инвертированных k-угольников плюс n_3 пар, удовлетворяющих условиям (2) или (6), то помимо копии о.с. на функции выделения M_{k+1} фиксируются еще $n_3(n_1 - 1) + n_2(n_3 - 1)$ дополнительных точек, которые легко локализовать по методу параллельного вектора.

Таким образом, чтобы избавиться от лишних копий, выделяемых k-угольником и вызванных его кратностью, переход к выделяющему многоугольнику ранга $k + 1$ осуществляется путем добавления любой точки в.с. Если эта точка единичная (конец единичного вектора), то выделяется просто одна копия о.с., если кратная, то согласно доказанному выше, помимо копии о.с., фиксируются еще и ложные точки (которые легко локализуются). Это последнее обстоятельство в алгоритме повышения ранга k-угольника (при выделении о.с. из в.с.) выпало из поля зрения Бюргера [2]. Кроме того нам представляется необходимым дополнить алгоритм Бюргера еще одним условием: *выделяющий многоугольник не должен быть центросимметричной фигурой*; иначе, по аналогии с алгоритмом разложения в.с. по отрезку Бюргера [2], фиксируются две копии о.с. (при условии, что кристаллографический центр инверсии не совпадает с собственным центром симметрии многоугольника).

Приводим доказательство последнего утверждения. Пусть в в.с. существует центросимметричный многоугольник $1,1', 2,2', \ldots, k, k'$; точки i и i' связаны его собственным центром инверсии, т. е. для $2k$-угольника выполняется условие (9), аналогичное условию (5) для двух k-угольников:

$$\begin{gathered} \mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{2'1'}, \\ \cdots\cdots\cdots \\ \mathbf{r}_{1k} = \mathbf{r}_{k'1'}. \end{gathered} \tag{9}$$

По рецептам [4] условие выделения копии о.с. по многоугольнику отражается равенством соответствующих элементов из всех строк матрицы

$$\begin{pmatrix} 1X & X1' & X2 & 2'X \\ 1X & X1' & X3 & 3'X \\ \cdots & \cdots & \cdots & \cdots \\ 1X & X1' & Xk & k'X \end{pmatrix} \tag{10}$$

Таким образом, выделяются две копии основной системы $1X$ и $X1'$: первая — изображение в т. 1, вторая инвертирована (изображение в т. $1'$) и смещена на вектор $\mathbf{r}_{11'}$.

В свете указанных дополнений ретроспективное обращение к алгоритму разложения в.с. позволяет предложить рецепты выделения одной копии о.с.

Если первоначального проявителя — отрезка недостаточно для получения единственной копии о.с., то при выполнении условий Кокрена ([3]), отрезок следует дополнить до треугольника, четырехугольника, ..., до k-угольника. Далее, методом параллельного вектора убеждаемся, есть ли в в.с. равные или инвертированные k-угольники. В первом случае при объединении равных k-угольников в $2k$-угольник, последний выделяет одну копию о.с. *, во втором случае — при объединении прямого и инвертированного k-угольников в $2k$-угольник — приходим к двум копиям о.с. (из-за наличия собственного ц. с. в $2k$-угольнике *).

Таким образом, можно сформулировать вывод: на функции выделения M_k фиксируется одна копия о.с., если в о.с. нет больше k-угольников, равных или инвертированных выделяющему исходному, или если последний не обладает собственным центром симметрии.

Горьковский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского

Институт кристаллографии
Академии наук СССР
Москва

Поступило
14 I 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] D. Wrinch, Phil. Mag., 27, 98 (1939); 27, 490 (1939). [2] М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, М., 1961. [3] W. Cochran, Acta crystallogr., 11, 579 (1958). [4] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 196, № 5 (1970). [5] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ЖСХ, 12, № 3, 447 (1971).

* $2k$-угольник в о.с. должен быть единственным.