

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

О ВЕКТОРНЫХ ПОДСИСТЕМАХ МНОГОУГОЛЬНИКОВ В ТРЕХМЕРНОЙ ПАТЕРСОНОВСКОЙ ФУНКЦИИ

В (1) было показано, что при наличии в основной системе (о.с.) из N точек нескольких (n_1) равных и параллельных отрезков в процессе расшифровки векторной системы (в.с.), когда за конец вектора сдвига взят кратный пик, целесообразно перейти к векторной подсистеме (в.п.) концов этих отрезков. При этом, если отрезки, соединяющие пары точек о.с., не объединяются в цепочки и отстоят друг от друга на неравные расстояния*, то число точек в в.п. сокращается в $\sim (N/n_1)^2$ раз, и для расшифровки в.с. необходимы всего лишь $(n_1 + 2)$ шага вместо обычных $(N - 1)$. Выделенную по рецептам (1) в.п. можно считать в.п. отрезка (двухугольника) (обозначим ее (в.п.)₁).

Пусть часть точек о.с. из общего числа N подчиняется более общему условию (4), объединяющему условия (1) и (3):

$$\mathbf{r}_{p_x p_x} = \mathbf{r}_{p_x q_y} \quad (4)$$

(обозначения соответствуют (2)), но для них также не выполняется (2). В исходной в.с., соответствующей о.с. из N точек, переходим к (в.п.)₁, определяемой теми точками из (4), для которых справедливо лишь (1). Принимаем (в.п.)₁ за новую в.с. — (в.с.)₁ — и, не уменьшая общности, выбираем в качестве очередного вектора сдвига вектор $\mathbf{r}_{1'2'}$ ($= \mathbf{r}_{12}$) от нового начала до любой точки (в.п.)₁. А так как каждой точке, сохранившейся в (в.п.)₁, соответствует пара точек (отрезок) в о.с., то, следовательно, в исходной о.с. можно зафиксировать два отрезка, равных и параллельных $\mathbf{r}_{11'} = \mathbf{r}_{22'}$ и взаиморасстоящих на $\mathbf{r}_{1'2'} = \mathbf{r}_{12}$. Другими словами, в о.с. существует 4-угольник — параллелограмм — (4)₁, построенный на $\mathbf{r}_{11'}$ и $\mathbf{r}_{1'2'}$. Если в исходной о.с. можно выделить n_2 таких параллелограммов, то вектор $\mathbf{r}_{1'2'}$ в (в.п.)₁ будет n_2 -кратным.

Пусть вектор $\mathbf{r}_{1'2'}$ также не удовлетворяет условию (2), т. е. в (о.п.)₁ (а следовательно, и в исходной о.с.) нет цепочек атомов, параллельных $\mathbf{r}_{12}$, с звеном-шагом, равным его модулю; иными словами, n_2 параллелограммов не имеют ни общих точек, ни сторон, и они не должны взаиморасстоять на $\mathbf{r}_{11'}$ и $\mathbf{r}_{1'2'}$. Точки векторной системы такого параллелограмма о. с. будут располагаться на трех линейках, параллельных $\mathbf{r}_{11'}$ (через эти же точки в.с. можно провести три линейки, параллельные $\mathbf{r}_{1'2'}$), или, что то же самое, по вершинам 4 параллелограммов, которые равны исходному, имеют одну общую вершину и объединяются в большой параллелограмм (табл. 1). Назовем его (4)₂-четыреугольником второго порядка, и тогда векторную систему параллелограмма (4)₁ запишем как совокупность 3¹ линеек $= 4(4)_1 = (4)_2$.

* Т. е. при выполнении условия

$$\mathbf{r}_{11'} = \dots = \mathbf{r}_{n_1 n_1'} \quad (1)$$

не выполняются условия

$$\mathbf{r}_{kl} = \mathbf{r}_{11'}; \quad \mathbf{r}_{kl} = 2\mathbf{r}_{11'}, \quad (2)$$

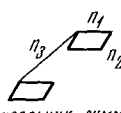
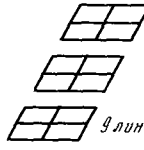
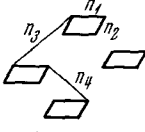
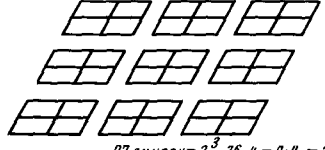
$$\mathbf{r}_l = \mathbf{r}_{k'} \quad (3)$$

при $k \neq l$; $k, l = 1, \dots, n_1$.

Теперь в (в.п.)₁ методом параллельного вектора перейдем к в.п. концов $r_{1'2'}$, или, что то же самое, в исходной в.с. $\{ \equiv (в.с.)_0 \}$ переходим к в.п. правых верхних вершин параллелограммов, т. е. к (в.п.)₂. Все остальные точки на этой вторичной векторной подсистеме — (в.п.)₂ — не проявятся и число точек в ней сокращается по сравнению с числом точек в (в.с.)₀ в $\sim (N/n_1)^2 (n_1/n_2)^2$ раз. Полученная (в.п.)₂ будет в.п. для многоугольника с числом сторон, равным $2^2 = 4$.

Пусть в (в.п.)₂ сохранился еще какой-то вектор от нового начала (т. 2'), скажем $r_{2'4'}$ (естественно, что должен быть и обратный вектор,

Таблица 1

n_i	2^i	вид многоугольника	в.с. соответствующая многоугольнику
n_1	2^1	 отрезок	 1 линейка = 3°
n_2	$2^2=4$	 параллелограмм	 3 линейки = $3^1=4 \cdot 1 = 4_2$
n_3	$2^3=8$	 6-угольник = сумма 2-х параллелограммов	 9 линейки = $3^2=12 \cdot 1 = 3 \cdot 4_2 = 4_3$
n_4	$2^4=16$	 16-угольник	 27 линейки = $3^3=36 \cdot 1 = 9 \cdot 4_2 = 3 \cdot 4_3 = 4_4$
n_i	2^i	2^i -угольник	3^{i-1} линейки = $3^{i-1} = (4 \cdot 3^{i-2}) \times 1 = 3^{i-2} \cdot 4_2 = 3^{i-3} \cdot 4_3 = \dots = 3^{i-i} \cdot 4_{i-1} = 4_i$

поскольку т. 2' — центр инверсии). Это означает, что в исходной о.с. — (о.с.)₀ — имеется восьмиугольник (в общем случае параллелепипед), образованный двумя параллелограммами (4)₁, отстоящими на $r_{2'4'} = r_{2'1'}$. При наличии в (о.с.)₀ n_3 таких восьмиугольников выбранный вектор $r_{2'4'}$ в (в.п.)₂ будет иметь кратность n_3^* . В.с. такого 8 (= 2³)-угольника можно разложить на 3² линейки = 12 (4)₁ = 3 (4)₂ = (4)₃. Аналогично, методом параллельного вектора от (в.п.)₂ переходим к (в.п.)₃ для верхних правых вершин 2³ (= 8)-угольника при соответствующем сокращении числа точек в $\sim (N/n_1)^2 (n_1/n_2) (n_2/n_3)$ раз по сравнению с начальной в.с. — (в.с.)₀.

Таким образом, если в исходной о.с. имеется несколько многоугольников с четным (2ⁱ) числом сторон кратности $n_1, n_2, \dots, n_i$, то можно от (в.с.)₀ перейти к (в.п.)_i i-го порядка, представляющей собой в.п. 2ⁱ-угольника и содержащей в $\sim (N/n_1)^2 \dots (n_{i-1}/n_i)^2$ раз меньше точек по

* На вектор сдвига здесь и далее накладывается условие: не выполняется (2). Как следствие, многоугольники (2ⁱ) не должны иметь общих точек, сторон, граней, и они взаимно удалены на векторы, не равные их отдельным ребрам.

сравнению с исходной (в.с.)₀. В.с. для указанных многоугольников можно свести в таблицу, отражающую связь вида многоугольника (число вершин — 2^i), его кратности (n_i) в (о.с.)₀ и соответствующей ему в.с. (табл. 1). Поскольку (в.п.)_i остается векторной системой в общем смысле этого слова, то к ней применимы все известные алгоритмы расписфровки обычных в.с., но сам процесс расписфровки существенно облегчается ввиду резкого сокращения числа анализируемых точек. И наоборот, если после i -разового последовательного применения метода параллельного вектора наша (в.п.)_i будет состоять только из одной точки, то следовательно, в (о.с.)₀ имеет место 2^i -угольник, построенный на i векторах. Его можно взять в качестве выделяющего многоугольника. Разложение исходной в.с. по нему приводит, согласно (3), к двум копиям о.с., переход от которых к единственной осуществляется трафаретным путем по (4).

Институт кристаллографии
Академии наук СССР
Москва

Поступило
20 IV 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ЖСХ, **12**, 643 (1971); **11**, 943 (1970). ² Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, **201**, № 5 (1971). ³ Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, **205**, № 2 (1972). ⁴ Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, **193**, № 3 (1969).