

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

ФУНКЦИЯ ПАТЕРСОНА КАК ВЕКТОРНАЯ СИСТЕМА ОТРЕЗКОВ. ОБЩИЙ СЛУЧАЙ, ФЕДОРОВСКАЯ ГРУППА P_1

Представление атомной структуры и межатомной функции в виде основной (о.с.) и векторной (в.с.) систем точек оказалось весьма эффективным при рассмотрении функции Патерсона как единого целого ^(1, 2). При выполнении условий Кокрена ⁽³⁾ разложение точечной в.с. может быть осуществлено до конца, причем наиболее просто с помощью функций выделения, закон построения которых очевиден в условиях возможности выбора для основного сдвига векторов единичной кратности ⁽¹⁻³⁾.

При переходе к сложным структурам с большим числом атомов в ячейке в реальной функции Патерсона неизбежно наложение и перекрытие межатомных взаимодействий, и основным моментом в расшифровке патерсоновских синтезов становится детальный анализ пиков, которые могут стать ключами * к выделению структуры, в частности векторами сдвига.

В связи с этим выдвигается задача фиксации такой минимальной составляющей, которая дает качественно полный набор патерсоновских пиков; этим наименьшим фрагментом будет отрезок и, действительно, суммарную функцию Патерсона можно представить как векторную систему отрезков.

Указанный качественно новый (по сравнению с ⁽¹⁻³⁾) подход к о.с. и в.с. как системам отрезков** лежит в основе предложенных в последние годы приемов расшифровки патерсоновских синтезов: метода ромбов, метода кратных (произвольных) пиков, метода пиков взаимодействия ⁽⁴⁻⁶⁾.

Обращаясь вслед за ^(1, 2) к наиболее компактному описанию в.с. отрезков, а именно, матричному.

Пусть для простоты о.с. состоит из двух отрезков: 1—2 (отрезок A) и 3—4 (отрезок B). Соответствующая матрица (в.с.) имеет вид

11	12	13	14
21	22	23	24

(1)

31	32	33	34
41	42	43	44

Анализ свойств матрицы становится особенно простым, если объединить все ее элементы в 4 блока. Правый верхний включает векторы между отрезками A и B (т. е. AB). В терминологии ^(1, 2) правая строка блока — это изображение отрезка B в точке 1 отрезка A , и, следовательно, она отражает наличие в в.с. отрезка, параллельного отрезку B . Вторая (нижняя) строка блока — изображение этого же отрезка в точке 2 отрезка A — представляет также параллельный B отрезок. Одновременно первый столбец

* В дальнейшем будем называть их ключевыми пиками.

** Именно отрезок, а не любое другое объединение точек, необходимо взять за инкремент о.с., так как всегда можно выделить отрезок в в.с. и всякому отрезку из начальной звезды в.с. ⁽⁴⁾ можно однозначно привести в соответствие отрезок в о.с. и обратно.

блока соответствует отрезку, параллельному A (будучи изображением одного конца B — точки 3 в отрезке A); аналогично второй столбец также отвечает отрезку, параллельному A и представляющему изображение точки 4 в отрезке A . Т. е. все элементы, объединенные в блок, отражают факт, что соответствующие концы векторов располагаются по вершинам параллелограмма со сторонами, равными и параллельными A и B .

Аналогичный параллелограмм взаимодействия (см. ⁽⁴⁾) образуют векторы левого нижнего блока (BA). Оба параллелограмма AB и BA связаны центром инверсии в начале координат (блоки симметричны относительно главной диагонали матрицы (1)).

Два остальных блока матрицы (1) — верхний левый и нижний правый — объединяют векторы между собственными концами отрезков A и B , т. е. AA и BB . Каждому из этих блоков отвечает вырожденный параллелограмм — линейка по ⁽⁵⁾: две вершины слились в начале ячейки, а две другие симметричны относительно него.

Таким образом, в сокращенном виде матрицу (1) можно записать как

$$\begin{matrix} AA & AB \\ BA & BB \end{matrix} \quad (2)$$

В ней каждый элемент соответствует параллелограмму; два — вырожденных (линейки) и два — параллелограммы взаимодействия. Выделение каждого параллелограмма взаимодействия легко осуществить двояким путем: либо построением функции $M_2(A)$ и по ней функции $M_2(B)$ (см. ⁽⁵⁾), либо построением трех независимых функций $M_2(A)$, $M_2(B)$ и $M_2(A+B)$ и далее объединением их в суммарную M_4 . На результирующей M_4 в обоих случаях фиксируется вершина параллелограмма, по которой достаточно просто восстановить весь параллелограмм ^(4, 5).

При наличии в о.с. K отрезков, в.с. отрезков будет характеризоваться K^2 параллелограммами взаимодействия*, которые отображены в расширенной матрице

$$\begin{matrix} AA & AB & \dots & AK \\ BA & BB & \dots & BK \\ \dots & \dots & \dots & \dots \\ KA & KB & \dots & KK \end{matrix} \quad (3)$$

Матричная форма записи четко показывает взаимосвязь обоих представлений функции Патерсона: как в.с. точек и как в.с. отрезков (табл. 1).

Таблица 1

Векторная система точек	Векторная система отрезков
Точка	Параллелограмм
Начальный пик	Начальная звезда
Число точек K^2	Число параллелограммов K^2
n -Кратный пик	n -Кратный параллелограмм

Начальному пику в в.с. точек соответствует начальная звезда в в.с. отрезков, точкам общего положения — параллелограммы и т. д. Если в в.с. точек конец вектора указывает положение одного отрезка (один конец отрезка в начале координат), то в представлении в.с. отрезков параллелограмм локализует положения двух отрезков, один из которых принадлежит начальной звезде.

* При этом K параллелограммов вырождаются в линейки и образуют начальную звезду.

Весьма существенно, и это уже отмечалось выше, что можно установить однозначное соответствие между отрезками в о.с. и в.с. (т. е., соединив начало координат с любой точкой в.с., можно утверждать, что такой отрезок существует и в о.с.), чего нельзя сказать о параллелограмме в.с. и паре отрезков в о.с., поскольку параллелограмм может быть образован и случайным расположением точек в в.с. В последнем случае вершинами его * будут концы векторов более чем между 4 точками о.с. Матричный блок подобного ложного параллелограмма выглядит так:

$$\begin{bmatrix} AB & CD \\ EF & GH \end{bmatrix}. \quad (4)$$

причем обязательно должно быть выполнено хотя бы одно из условий:

$$A \neq C, \quad (5)$$

$$B \neq F, \quad (6)$$

$$D \neq H. \quad (7)$$

$$E \neq G. \quad (8)$$

Легко распознается и отбрасывается ложный параллелограмм, возникающий систематически, когда для 4 точек о.с. i, j, m, n выполняются условия

$$r_{ij} = r_{mn}, \quad (9)$$

$$r_{im} = r_{jn}, \quad (10)$$

т. е. когда сами эти точки образуют параллелограмм в о.с. Векторы между любой произвольной точкой X о.с. и вершинами параллелограмма $ijmn$ естественно будут сторонами двух параллелограммов (но каждый из них образован векторами между пятью точками о.с.!), описываемых блоками:

$$\begin{bmatrix} iX & jX \\ mX & nX \end{bmatrix} \quad (11)$$

$$\begin{bmatrix} Xi & Xj \\ Xm & Xn \end{bmatrix} \quad (12)$$

Каждый такой параллелограмм построен на двух исходных векторах начальной звезды в.с., и поэтому его легко отбраковать.

Если два отрезка о.с. равны и параллельны друг другу, то параллелограмм вырождается в линейку, параллельную линейке начальной звезды. Пусть в приведенном примере имеет место

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{34}, \quad (13)$$

т. е. $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_1 = \mathbf{r}_4 - \mathbf{r}_3$, или $\mathbf{r}_2 - \mathbf{r}_4 = \mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_3$, и, следовательно,

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{31}, \quad (14)$$

$$\mathbf{r}_{24} = \mathbf{r}_{13}. \quad (15)$$

В блоках AB и BA матрицы (1) элементы, расположенные по главной диагонали блока, становятся равными, и налицо вырождение параллелограмма в линейку.

* Такой параллелограмм будем называть ложным, в противовес закономерному параллелограмму, возникающему в результате взаимодействия двух отрезков.

Таким образом, представление функции Патерсона как векторной системы отрезков позволяет через локализацию параллелограммов взаимодействия быстро отыскивать векторы между концами фиксированных отрезков и перейти в дальнейшем к векторным подсистемам нескольких отрезков и тем самым существенно облегчить процесс расшифровки патерсоновских карт.

Горьковский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского

Поступило
11 VII 1972

Институт кристаллографии им. А. В. Шубникова
Академии наук СССР
Москва

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

¹ D. Wrinch, Phil. Mag., 27, 98 (1939); 27, 490 (1939). ² М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, М., 1971. ³ W. Cochran, Acta crystallogr., 11, 579 (1958). ⁴ Э. А. Кузьмин, В. П. Головачев, Н. В. Белов, ДАН, 190, № 2 (1970). ⁵ Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, ДАН, 182, 1067 (1968); ЖСХ, 9, 820 (1968); 11, 943 (1970); 12, 433 (1971). ⁶ С. В. Борисов, Кристаллография, 9, № 5 (1964).