

Э. А. КУЗЬМИН, В. П. ГОЛОВACHEВ, академик Н. В. БЕЛОВ

О ВЕКТОРНЫХ СИСТЕМАХ ОТРЕЗКОВ В ОСОБЫХ ПОЛОЖЕНИЯХ (ВЫРОЖДЕНИЕ РОМБОВ ПИКОВ)

Наиболее полную информацию из анализа патерсоновских синтезов можно извлечь, используя представление о системах отрезков и строя соответствующие ромбы пиков (¹⁻³). Однако в практической работе могут возникнуть осложнения, связанные с особыми положениями отрезков относительно элементов симметрии федоровской группы и приводящие к различным видам вырождений ромбов в векторной системе. В настоящей работе рассмотрены закономерности вырождения ромбов, которые связаны с частным положением исходного отрезка основной системы (о.с.) по отношению к единственному элементу симметрии второго порядка.

Такие примитивные федоровские группы (ф.г.) распределяются по трем классам: C_1 , C_2 , C_s . О.с. этих групп состоят из двух симметрично связанных отрезков и соответствующие в.с. содержат четыре ромба *, попарно связанных ц.с.; один из ромбов — в общем положении, а другой вырождается в линейку и входит в начальную звезду. Все случаи вырождения приведены в табл. 1 (различные варианты взаимного расположения базисных отрезков и элементов симметрии).

1) Если исходный отрезок параллелен (вариант I, табл. 1) или перпендикулярен (вариант II) элементу симметрии, то ромб вырождается в тройку пиков — линейку (⁴); существенно, что в первом случае сливаются пики связки, во втором — пики взаимодействия **.

Ромб идентичности, объединяющий векторы между концами одного отрезка и входящий в начальную звезду, также вырождается в линейку с удвоенными пиками связки (тем самым соответствующий отрезок можно считать параллельным элементу первого порядка).

Центр инверсии представляется точкой, и поэтому любой отрезок можно считать ему перпендикулярным, и, следовательно, центросимметричный ромб будет всегда линейкой с двукратными пиками взаимодействия. С другой стороны, когда исходный отрезок параллелен или перпендикулярен какому-то элементу симметрии, то два отрезка о.с. оказываются связанными не только данным элементом симметрии, но и псевдоцентром инверсии, который приводит к вырождению ромбов в линейки. Так как кратность исходного отрезка в этом случае удваивается, то две линейки начальной звезды взаимно накладываются (так же, как и в группе $P\bar{1}$).

2) Если один конец отрезка лежит на поворотном элементе симметрии, то исходный отрезок имеет общую точку с размноженным (вариант III). С целью единого подхода можно считать (как здесь, так и в дальнейшем), что воздействие данного элемента на эту точку аналогично воздействию псевдооси первого порядка. И тогда оба отрезка имеют общий пик связки, расположенный в начале координат, который будет общим и для всех четырех ромбов, и каждый из них от данной операции имеет два общих пика взаимодействия с ромбами идентичности, т. е. две общие стороны с начальной звездой.

* В группе $P\bar{1}$ два ромба начальной звезды сливаются в один.

** При наличии трансляционного компонента в элементе симметрии тройка пиков окажется соответствующим образом смещенной (вариант II, табл. 1).

Таблица 1

Ф. 2.			Ф. 3.		
Основная система			Основная система		
Векторная система			Векторная система		
I	ρ_m		V	ρ_m	
II	ρ_a		VI	ρ_a	
III	ρ_m		VII	ρ_m	
IV	ρ_a				

Если поворотный элемент заменить на скользящий (IV, табл. 1), то два конца разных отрезков будут связаны псевдополутрансляцией, остающейся от этого элемента и поэтому пара ромбов от элемента со скольжением должна иметь общий пик связи, смещенный из начала на соответствующую полутрансляцию, и две смежные стороны их будут отстоять от линеек начальной звезды на то же самое расстояние.

Таким образом, расположение одного из концов отрезка на элементе симметрии приводит для пары ромбов к общему пику связи, который смещен из начала на соответствующую полутрансляцию (для поворотного элемента смещение равно нулю).

В частном случае такого вырождения весь исходный отрезок (оба его конца) лежит на одном элементе симметрии (вариант V, табл. 1). По аналогии с вариантом I (табл. 1) ромбы вырождаются в линейки. Более того, действие поворотного элемента симметрии сводится к операции тождества (1 порядка), и оба ромба полностью сливаются с линейкой начальной звезды. Для скользящего элемента отрезки (вариант VI, табл. 1) связаны полутрансляцией, и, следовательно, соответствующая линейка (ее середина) будет отстоять от начальной звезды на то же самое расстояние. При исходном отрезке, перпендикулярном элементу симметрии (плоскость симметрии проходит через его центр), соответствующая пара ромбов сливается с линейкой начальной звезды независимо от наличия (или отсутствия) скользящей компоненты (вариант VII, табл. 1).

Таким образом, нахождение отрезка в частном положении всегда приводит к псевдосимметрии, результатом которой является вырождение ромбов, частное или полное их наложение.

Основные результаты, полученные для единственного элемента симметрии 2 порядка, останутся в силе и легко могут быть распространены на федоровские группы с несколькими элементами симметрии.

Физико-технический исследовательский институт
при Горьковском государственном университете
им. Н. И. Лобачевского

Поступило
11 VII 1972

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

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ Э. А. Кузьмин, В. П. Головачев, Н. В. Белов, ДАН, 192, № 1, 86 (1970).
² Э. А. Кузьмин, В. П. Головачев, Н. В. Белов, Кристаллография, 16, в. 5, 875 (1971). ³ Э. А. Кузьмин, В. П. Головачев, Н. В. Белов, Кристаллография, 17, в. 3, 477 (1972). ⁴ Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, Кристаллография, 14, в. 6, 1059 (1969).