Доклады Академии наук СССР
1973. Том 209, № 2

УДК 548.736

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

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

АНАЛИЗ ПАТЕРСОНОВСКОЙ ФУНКЦИИ

ВЕКТОРНЫЕ ПОДСИСТЕМЫ, ОТВЕЧАЮЩИЕ НЕСКОЛЬКИМ КРАТНЫМ ПИКАМ (СОВОКУПНОСТЯМ ИЗОЛИРОВАННЫХ ОТРЕЗКОВ)

Возникновение в функции Патерсона кратных пиков обусловлено закономерностями в расположении точек основной системы (о.с.), а именно, возможностью объединения их в совокупности (группы) равных и параллельных отрезков ([1а]). При этом каждой группе равных и параллельных отрезков в о.с. в соответствующей векторной (в.с.) отвечает «свой» кратный пик.

Пусть в о.с. среди N точек имеются $2n_1$, $2n_1'$, ..., $2n_1^i$ таких, что они образуют разные достаточно дискретные совокупности равных и параллельных отрезков *. В соответствующей функции Патерсона возникает конечное число $(1, \ldots, i)$ наложившихся (кратных) пиков кратности n_1, n_1', ..., n_1^i ([1в–д]).

Докажем, что в такой векторной системе (в.с.) с несколькими кратными (произвольными) пиками можно перейти к векторной подсистеме (в.пс.) двух (и более) кратных пиков, иными словами, к в.пс., соответствующей основной подсистеме (о.пс.) двух (и более) совокупностей отрезков, и эта новая векторная подсистема будет в.с. для основной подсистемы из точек — середин отрезков, составляющих эти совокупности.

Доказательство приведем сначала для частного случая 4 отрезков. Пусть в о.с. из N точек для 4 пар справедливо

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{34}, \qquad \mathbf{r}_{1'2'} = \mathbf{r}_{3'4'}. \tag{1}$$

(Рис. 1*а* (в общем случае $\mathbf{r}_{12} \neq \mathbf{r}_{1'2'}$)).

Строящаяся в.с. отрезков (векторы между концами отрезков и остальными точками о.с. можно не рассматривать, так как они исчезают при проводимых далее операциях) включает 16 параллелограммов, из которых 4 вырождаются в линейки, параллельные векторам $\mathbf{r}_{12}$ и $\mathbf{r}_{1'2'}$, и еще 4 попарно образуют начальную звезду. Остальные 8 параллелограммов взаимодействия отрезков ([5]) построены на векторах $\mathbf{r}_{12}$ и $\mathbf{r}_{1'2'}$ и связаны попарно центром инверсии в начале. На первом этапе переходим к векторной подсистеме любого отрезка ([1д–е]), например $\mathbf{r}_{12}$, другими словами, к функции выделения третьего ранга

$$M_3 = M\{M_2(\mathbf{r}_{12})\,[M_2(\mathbf{r}_{12})]\}, \tag{2}$$

путем последовательного сдвига на вектор $\mathbf{r}_{12}$ сначала двух патерсоновских карт (результат — M_2 — в квадратных скобках), а затем сдвига на тот же вектор $\mathbf{r}_{12}$ двух копий M_2 ($\mathbf{r}_{12}$), полученных на первом шаге (в фигурных скобках). Точки на $M_3 (\equiv \{\text{в.пс.}\}_1)$ представляют по ([1д]) в.с. для любых одинаковых точек на отрезках (равных и параллельных $\mathbf{r}_{12}$), составляющих основную подсистему **. Начало этой новой в.с. ($\equiv \{\text{в.пс.}\}_1$)

* Введем единственное ограничение (см. ниже): указанные отрезки не объединяются ни в цепочки, ни в параллелограммы по ([1б]).

** Поскольку для в.пс., отвечающей одному (кратному) пику и, следовательно, одной совокупности отрезков о.с., несущественно, каким одинаковым точкам отрезков из основной подсистемы она соответствует, то в ([1д]) для простоты и наглядности о.пс. была представлена одноименными концами отрезков.

смещено из начала исходной в.с. на $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_{12}+\mathbf{r}_{12})=\mathbf{r}_{12}$ [2, 3]. Аналогично строим

$$\{\text{в. пс.}\}_1' \equiv M_3' = M\{M_2(\mathbf{r}_{1'2'})\,[M_2(\mathbf{r}_{1'2'})]\}, \tag{3}$$

отвечающую второй совокупности отрезков. Начало этой новой в.с. смещено на $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_{1'2'}+\mathbf{r}_{1'2'})=\mathbf{r}_{1'2'}$.

Вернувшись еще раз к исходной в.с. (рис. 1*б*), выделим правые нижние вершины параллелограммов взаимодействия отрезков [1б] путем построения

$$M_4 = M\{M_2(\mathbf{r}_{1'2'})\,[M_2(\mathbf{r}_{12})\,]\}. \tag{4}$$

Начало результирующей карты сместится от исходного на $\frac{1}{2}(\mathbf{r}_{12}+\mathbf{r}_{1'2'})$. Объединяем точки, выделенные на M_3, M_3', M_4, в одну карту, совмещая

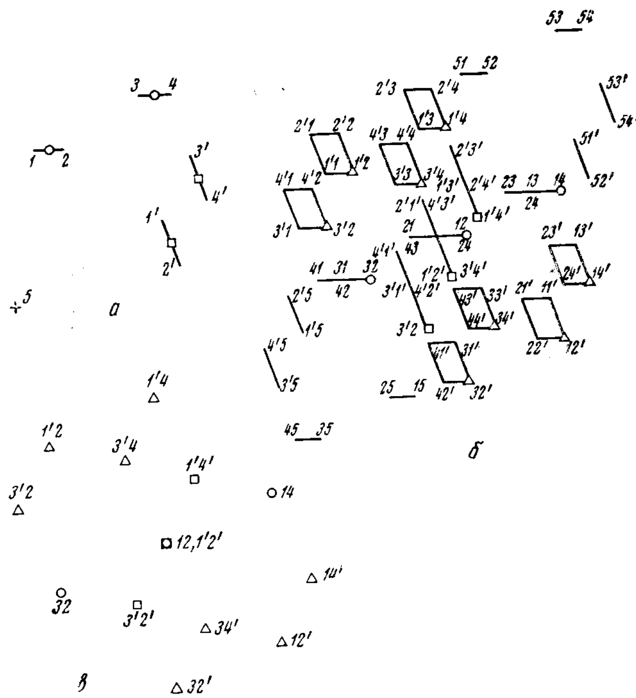

Рис. 1. *а* — о.с. из 4 отрезков, разбитых на две совокупности. Точка *5* представляет все прочие точки о.с., не входящие в отрезки. Выделены середины отрезков. *б* — в.с., отвечающая о.с. рис. 1*а*. Показаны точки, выделившиеся на M_3 (кружки), M_3' (квадраты) и M_4 (треугольники). *в* — объединенная в.пс. (соответствующая о.пс. середин отрезков) после совмещения начал трех функций выделения

начала трех карт «слагаемых». Точки объединенной карты будут в.с. для о.с. точек — середин отрезков (что наглядно демонстрируется матрицей (2) в [1б, 5] и рис. 1*в*).

Таким образом, векторную систему, отвечающую основной системе, часть точек которой объединена в изолированные отрезки, можно свести к в.пс., соответствующей о.пс. точек — середин этих отрезков.

Полученный на конкретном примере результат легко обобщить на случай любого конечного числа совокупностей отрезков в о.с. Не уменьшая общности, выберем две совокупности, точки которых подчиняются (5) и (6):

$$\mathbf{r}_{12} = \mathbf{r}_{34} = \ldots = \mathbf{r}_{i_k j_k} = \mathbf{r}_{2n_1-1,2n_1}, \tag{5}$$

$$\mathbf{r}_{1'2'} = \mathbf{r}_{3'4'} = \ldots = \mathbf{r}_{i_k' j_k'} = \mathbf{r}_{2n_1'-1,\,2n_1'}. \tag{6}$$

Условия отсутствия цепочек и параллелограммов взаимодействия, построенных на векторах $\mathbf{r}_{i_k j_k}$ и $\mathbf{r}_{i_k' j_k'}$, записываются соответственно как

$$\mathbf{r}_{i_k} \neq \mathbf{r}_{j_l}, \quad \mathbf{r}_{i_k'} \neq \mathbf{r}_{j_l'}, \tag{7}$$

$$\mathbf{r}_{i_k j_k} = \mathbf{r}_{i_l j_l} \neq \mathbf{r}_{i_k' j_k'} = \mathbf{r}_{i_l' j_l'}. \tag{8}$$

Наличие в о.с. и тех и других легко распознается по виду начальной звезды в.с.: либо по цепочке патерсоновских пиков, либо по параллелограмму, построенному на векторах начальной звезды ([1б], [5]).

В исходной в.с. вектора между отрезками двух совокупностей (условия (5) и (6)) располагаются на n_1^2 линейках, параллельных $\mathbf{r}_{2n_1-1,2n_1}$ ([4а]), на $(n_1')^2$ линейках, параллельных $\mathbf{r}_{2n_1'-1,2n_1'}$ и по вершинам $2n_1n_1'$ параллелограммов взаимодействия отрезков ([1б], [5]).

Условие выделения точек $\{\text{в.пс.}\}_1 = M_3 = M\{M_2(\mathbf{r}_{12})\,[M_2(\mathbf{r}_{12})\,]\}$, отвечающей совокупности n_1 отрезков, записывается аналитически (выделяются точки с индексами i_kj_l):

$$\mathbf{r}_{i_kj_k} + \mathbf{r}_{XX} = \mathbf{r}_{i_kX} - \mathbf{r}_{j_kX} = \mathbf{r}_{Xj_k} - \mathbf{r}_{Xi_k} \tag{9}$$

и в матричной форме ([4б]):

$$\begin{pmatrix} 1X & X2 & \ldots & i_kX & Xj_k & i_lX & Xj_l & \ldots \\ 1X & X2 & \ldots & i_kX & Xj_k & i_lX & Xj_l & \ldots \\ (2X) & (X1) & \ldots & (j_kX) & (Xi_k) & (j_lX) & (Xi_l) & \ldots \end{pmatrix}. \tag{10}$$

Так как

$$\mathbf{r}_{i_kj_l} = \mathbf{r}_{i_kj_k}(\mathbf{r}_{i_lj_l}) + \mathbf{r}_{j_kj_l}, \tag{11}$$

то перенос начала в новой в.с. $(\equiv\{\text{в.пс.}\}_1)$ на $\mathbf{r}_{j_ki_k} = {}^1/_2(\mathbf{r}_{12} + \mathbf{r}_{12}) = \mathbf{r}_{12}$ сохраняет только точки — концы векторов $\mathbf{r}_{j_kj_k}$. Тем самым, в силу сказанного выше, мы получим в.пс. для середин (любых точек) отрезков из совокупности n_1.

Аналогично выделяется $(\text{в.пс.})_1'$ — концы векторов $\mathbf{r}_{j_k'j_l'}$, — отвечающая основной подсистеме середин отрезков из совокупности n_1'.

Для выделения параллелограммов взаимодействия осуществляем сначала минимализацию $M_2\,(\mathbf{r}_{i_kj_k})$ и уже по ней $M_2\,(\mathbf{r}_{i_k'j_k'})$. Соответствующая матрица

$$\begin{pmatrix} 1X & X2 & \ldots & i_kX & Xj_k & i_lX & Xj_l \\ 1'Y & Y2' & \ldots & i_k'Y & Yj_k' & i_l'Y & Yj_l' \\ (2'Y) & (Y1') & \ldots & (j_k'Y) & (Yi_k') & (j_l'Y) & (Yi_l') \end{pmatrix} \tag{12}$$

оставляет на результирующей M_4 концы векторов с $\mathbf{r}_{i_k'j_l}$ и $\mathbf{r}_{i_kj_l'}$. Поскольку начало координат переносится на

$$R = {}^1/_2(\mathbf{r}_{i_kj_k} + r_{i_k'j_k'}) = {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'})$$

(здесь и далее индексы k можно опустить), то остаются точки:

$$\mathbf{r}_{ij'} - {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'}), \tag{13}$$

$$\mathbf{r}_{i'j} - {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'}). \tag{14}$$

Поскольку $\mathbf{r}_{i'j}$ можно представить как

$$\mathbf{r}_{i'j} = \mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'} - \mathbf{r}_{ij'}, \tag{15}$$

то (14) переписывается в виде

$$\mathbf{r}_{i'j} - {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'}) = {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'}) - \mathbf{r}_{ij'}; \tag{16}$$

тем самым точки — концы векторов $\mathbf{r}_{i'j}$ и $\mathbf{r}_{ij'}$ при переносе начала переходят в

$$\pm[\mathbf{r}_{ij'} - {}^1/_2(\mathbf{r}_{ij} + \mathbf{r}_{i'j'})\,]. \tag{17}$$

С другой стороны, для двух отрезков ij и $i'j'$ (обозначим их середины соответственно a и b, рис. 2) имеет место

$$\mathbf{r}_{ab}=\mathbf{r}_{ai}+\mathbf{r}_{ij'}+\mathbf{r}_{j'b}; \tag{18}$$

так как

$$\mathbf{r}_{ai}=-{}^1/{}_2\mathbf{r}_{ij}, \qquad \mathbf{r}_{j'b}=-{}^1/{}_2\mathbf{r}_{i'j'}, \tag{19}$$

то $\mathbf{r}_{ab}$ и $\mathbf{r}_{ba}$ переходят в

$$\pm[\mathbf{r}_{ij'}-{}^1/{}_2(\mathbf{r}_{ij}+\mathbf{r}_{i'j'})]. \tag{20}$$

Сравнивая (17) и (20), легко видеть, что на M_4 остаются концы векторов взаимодействия между точками — серединами отрезков из двух разных совокупностей о.с. Объединяя точки M_3 (концы векторов между серединами отрезков внутри совокупности n_1), M_3' (то же для n_1') и вышеупомянутой M_4, получаем на объединенной карте концы всех векторов между всеми точками — серединами отрезков обеих совокупностей, т. е. объединенные точки (при выполнении условий (7) и (8)) представляют векторную подсистему основной подсистемы средних точек отрезков, входящих в обе совокупности о.с. Иными, словами, если мы в исходной в.с. выбрали два любых вектора и построили функции выделения, зафиксировав последовательно сначала концы линеек $(M_3(\mathbf{R}_1))$, параллельных первому вектору, затем концы линеек $(M_3'(\mathbf{R}_1'))$, параллельных второму вектору, и, наконец, на $M_4=M\{M_2(\mathbf{R}_1')[M_2(\mathbf{R}_1)]\}$ — вершины параллелограммов, построенных на векторах $\mathbf{R}_1$ и $\mathbf{R}_1'$, то объединенная карта функций выделения будет новой векторной системой для точек — середин отрезков, равных и параллельных этим векторам (назовем ее $\{\text{в.пс.}\}_{11'}$. В ходе доказательства был дан и рецепт перехода к такой в.пс.

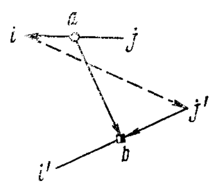

Рис. 2. Геометрическая интерпретация условий (18) и (19)

В самом общем случае при расшифровке любой в.с. можно выбрать несколько произвольных векторов $\mathbf{R}_1, \mathbf{R}_2, \ldots, \mathbf{R}_j$ и по любому их сочетанию по два (включая и самих себя) построить функции выделения, фиксирующие в.пс., отвечающие каждому отдельному вектору и совокупности этих векторов; карта, которая объединяет точки всех функций выделения, представляет векторную подсистему, основной подсистемой которой будут точки — середины отрезков, равных и параллельных векторам сдвига. Этот достаточно неожиданный результат позволяет сформулировать следующее утверждение.

Т е о р е м а. *Всякую векторную систему можно свести к векторной подсистеме, отвечающей любому конечному числу произвольных пиков, (концов векторов) исходной векторной системы; эта векторная подсистема будет новой векторной системой для средних точек отрезков основной системы, порождающих данные пики. Число точек в векторной подсистеме в* $\sim\left(\dfrac{N}{n_1+n_2+\ldots+n_i}\right)^2$ *раз меньше по сравнению с исходной векторной системой.*

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

Поступило
11 X 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, а) ДАН, **182**, 1067 (1968); б) ДАН, **207**, № 5 (1972); в) ДАН, **201**, 1092 (1971); г) ДАН, **189**, 774 (1969); д) ЖСХ, **12**, 643 (1971); е) ЖСХ, **12**, 447 (1971). [2] А. И. Китайгородский, ЖЭТФ, **21**, 717 (1951). [3] М. Бюргер, Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961. [4] Э. А. Кузьмин, В. В. Илюхин, Н. В. Белов, а) ЖСХ, **11**, 943 (1970); б) ДАН, **196**, 1080 (1971). [5] В. П. Головачев, Автореферат диссертации, М., 1970.