Доклады Академии наук СССР
1973. Том 209, № 1

УДК 511.444.2 + 548.1 *МАТЕМАТИКА*

Член-корреспондент АН СССР Б. Н. ДЕЛОНЕ, Р. В. ГАЛИУЛИН,
Н. П. ДОЛБИЛИН, В. А. ЗАЛГАЛЛЕР, М. И. ШТОГРИН

О ТРЕХ ПОСЛЕДОВАТЕЛЬНЫХ МИНИМУМАХ ТРЕХМЕРНОЙ РЕШЕТКИ

Пусть OA — самый короткий вектор трехмерной решетки Λ, OB — самый короткий вектор Λ, не параллельный вектору OA, и OC — самый короткий вектор решетки Λ, не параллельный плоскости OAB. Такие три вектора называются тремя последовательными минимумами решетки Λ, а параллелепипед Π, построенный на этих векторах,— приведенным.

Теорема 1. *Приведенный параллелепипед* Π *примитивный* (*пустой*).

Впервые эта теорема была геометрически доказана Дирихле в 1848 г. Это доказательство, приведенное в ([1]), всегда казалось кристаллографам несколько сложным, и поэтому Н. В. Белов предложил другое доказательство ([2], [3]). Ниже мы предлагаем доказательство, которое нам кажется еще более простым, и решаем вопрос об однозначности приведения к реперу из трех последовательных минимумов, так как, оказывается, в одной и той же решетке может быть несколько метрически различных параллелепипедов, построенных на таких реперах, причем даже один может быть тупоугольным, а другой остроугольным, что опровергает высказывание ([4]), стр. 150.

1. Доказательство теоремы 1. Пусть M — любая внутренняя точка приведенного параллелепипеда Π решетки Λ, M' — основание перпендикуляра, опущенного из M на ту из двух плоскостей какой-либо пары параллельных граней Π, к которой M ближе, M'' — основание перпендикуляра, опущенного из M' на ближайшую к M' прямую линейного ряда этой плоскости, параллельную какому-либо из ребер этой грани, и D — ближайший к M'' узел этого ряда. Из построения следует, что каждый из отрезков MM', $M'M''$, $M''D$ не превосходит половины соответствующего ребра параллелепипеда Π, а поэтому и половины наибольшего его ребра c, и что все эти отрезки попарно взаимно перпендикулярны. По теореме Пифагора получаем поэтому $MD \leqslant c\sqrt{3}/2 < c$.

Таким образом, никакая внутренняя точка Π не может быть точкой Λ, так как вектор MD решетки Λ был бы тогда не параллелен плоскости OAB и короче вектора c.

То, что никакая внутренняя точка грани или ребра Π не может быть точкой Λ, можно доказывать, как у Н. В. Белова (([5]), стр. 6).

2. Другой вариант доказательства теоремы 1.

Лемма. *Ближайшая точка* M' *границы* n*-мерного многогранника к любой внутренней его точке* M *есть внутренняя точка некоторой его* $(n-1)$*-мерной грани.*

Пусть p — ближайшая к M $(n-1)$-мерная плоскость $(n-1)$-мерной грани многогранника и M' — основание перпендикуляра, опущенного на нее из точки M. n-мерный шар с центром в M и радиусом MM' лежит, очевидно, весь по внутреннюю сторону от $(n-1)$-мерных плоскостей всех других $(n-1)$-мерных граней многогранника (т. е. по ту, по которую лежит точка M), кроме точек границы шара, в которых, может быть, касаются некоторые из этих плоскостей, а именно те, которые столь же удалены от M, как плоскость p. Поэтому и точка M' лежит по внутреннюю сторону от всех этих других плоскостей, и поэтому она есть внутренняя точка той $(n-1)$-мерной грани, которая лежит в плоскости p.

Теорема 2. *Расстояние от любой внутренней точки M любого n-мерного параллелепипеда P до ближайшей его вершины не больше половины квадратного корня из суммы квадратов всех n попарно непараллельных его ребер.*

Пусть M' — ближайшая к M точка границы P. По лемме точка M' является внутренней точкой $(n-1)$-мерного параллелепипеда P', являющегося некоторой $(n-1)$-мерной гранью. Ближайшая к M' точка M'' границы P' является внутренней точкой $(n-2)$-мерного параллелепипеда P'', являющегося некоторой $(n-2)$-мерной гранью P', и т. д. Так получается ломаная $MM'M''\ldots D$, где D — некоторая вершина параллелепипеда P. Все звенья этой ломаной, как легко видеть, попарно взаимно перпендикулярны, и длина каждого из них не больше половины длины соответствующего ребра параллелепипеда P, поэтому для расстояния MD мы по теореме Пифагора получаем утверждаемое неравенство.

Следствие. *Если l — длина наибольшего из ребер n-мерного параллелепипеда, то расстояние от любой внутренней его точки до ближайшей его вершины не больше $l\sqrt{n}/2$.*

Из оценки следствия при $n=1$, 2, 3 мы, как в п. 1, получаем соответственно, что ни внутри ребра, ни внутри грани, ни внутри самого приведенного параллелепипеда Π дополнительных узлов решетки Λ быть не может, т. е. верна теорема 1. При $n=4$ теорема 1 имеет единственное исключение. В кубической объемноцентрированной четырехмерной решетке, хотя ребра куба являются последовательными минимумами решетки, сам куб не является примитивным.

3. Алгорифм приведения к параллелепипеду Π. Если a, b, c, d — векторы приведенного четырехсторонника Зеллинга, то последовательные минимумы решетки находятся среди 7 векторов a, b, c, d, $\lambda=b+c$, $\mu=c+a$, $\nu=a+b$ (см. ([6]), стр. 183).

Обратим внимание на тот важный факт, что этот способ разыскания репера из последовательных минимумов обладает тем достоинством, что позволяет найти все имеющиеся в решетке такие различные реперы, которых имеется лишь конечное число.

Пример. Рассмотрим решетку со следующими приведенными параметрами Зеллинга: $g=-7$, $h=-8$, $k=-15$, $l=-2$, $m=-3$, $n=-5$. Квадраты длин 7 векторов, среди которых находятся последовательные минимумы, следующие: $a^2=25$, $b^2=25$, $c^2=20$, $d^2=10$, $\lambda^2=31$, $\mu^2=29$, $\nu^2=20$. Векторы d, c, ν, отвечающие единственной тройке наименьших чисел (10, 20, 20), компланарны. Любая тройка векторов $\{d, c, b\}$, $\{d, c, a\}$, $\{d, \nu, b\}$, $\{d, \nu, a\}$, отвечающая следующей по величине тройке чисел (10, 20, 25), образует репер из последовательных минимумов. Непосредственный подсчет показывает, что реперы $\{-d, \nu, b\}$ и $\{-d, \nu, a\}$ остроугольные и метрически различные, а реперы $\{d, c, b\}$ и $\{d, c, a\}$ — тупоугольные и метрически различные.

4. Условия однозначного приведения к реперу из трех последовательных минимумов. В любой трехмерной решетке выберем, следуя Минковскому, такой репер из последовательных минимумов, чтобы углы между первым и вторым, а также вторым и третьим его векторами были не тупые, что всегда можно сделать, изменяя, если нужно, некоторые векторы на обратные. Метрические параметры такого репера удовлетворяют следующим независимым неравенствам (неравенствам Минковского):

$$0 \leqslant 2a_{12} \leqslant a_{11} \leqslant a_{22} \leqslant a_{33},$$
$$0 \leqslant 2a_{23} \leqslant a_{22},$$
$$-a_{11} \leqslant 2a_{13} \leqslant a_{11},$$
$$0 \leqslant a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}.$$

Никакие два метрически различных репера, метрические параметры которых удовлетворяют всем этим строгим неравенствам приведения, не могут принадлежать одной и той же решетке ([7]). Однако встречаются метрически различные реперы, удовлетворяющие этим нестрогим неравенствам приведения, принадлежащие одной и той же решетке. Для устранения последнего недостатка, в случае выполнения некоторых равенств, на параметры репера надо наложить еще связанные с этими равенствами дополнительные неравенства, которые можно задавать по-разному, например, так, как указано в табл. 1.

Таблица 1

1. $0 < 2a_{12} < a_{11} < a_{22} < a_{33}$, $0 < 2a_{23} < a_{22}$, $-a_{11} < 2a_{13} < a_{11}$, $0 < a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$.
2. $a_{12} = 0$, $a_{23} \geqslant 0$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{22} > 2a_{23}$, $a_{11} > 2a_{13}$; $a_{13} \geqslant 0$.
3. $a_{23} = 0$, $a_{12} > 0$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{11} > 2a_{13}$; $a_{13} \geqslant 0$.
4. $a_{11} = a_{22}$, $0 < a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{12} > 0$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{22} > 2a_{23}$; $a_{13} \leqslant a_{23}$, $a_{13} + a_{23} \geqslant 0$,
5. $a_{22} = a_{33}$, $a_{23} > 0$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{22} > 2a_{23}$, $0 < a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$; $a_{12} \geqslant a_{13}$, $a_{12} + a_{13} \geqslant 0$.
6. $a_{11} = 2a_{12}$, $a_{22} \leqslant a_{33}$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{22} > 2a_{23}$, $a_{11} > 2a_{13}$; $a_{13} \geqslant 0$, $2a_{23} \geqslant a_{13}$.
7. $a_{22} = 2a_{23}$, $a_{12} > 0$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{11} > 2a_{13}$, $a_{22} < a_{33}$; $a_{12} - 2a_{13} \leqslant 0$.
8. $a_{11} = 2a_{13}$, $a_{11} \leqslant a_{22}$, $a_{12} \geqslant 0$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{22} > 2a_{23}$; $a_{12} - 2a_{23} \leqslant 0$.
9. $0 = a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{11} \geqslant 2a_{12}$, $a_{11} \leqslant a_{22}$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{11} + 2a_{13} > 0$; $a_{22} - 2a_{23} \geqslant a_{12}$.
10. $a_{11} = a_{22}$, $a_{22} = a_{33}$, $a_{22} \geqslant 2a_{23}$, $0 \leqslant a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$; $a_{13} \leqslant 0$, $a_{12} \leqslant a_{23}$, $a_{12} + a_{13} \geqslant 0$.
11. $a_{11} = a_{22}$, $a_{22} = a_{33}$, $a_{22} > 2a_{23}$; $a_{12} \leqslant a_{23}$, $a_{12} \geqslant a_{13}$, $a_{13} > 0$.
12. $0 = a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{22} = a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{11} < a_{22}$; $a_{12} + a_{13} \geqslant 0$, $a_{22} - 2a_{23} \geqslant a_{12}$.
13. $a_{22} = 2a_{23}$, $a_{22} \leqslant a_{33}$, $a_{12} = 0$, $a_{11} > 2a_{13}$, $a_{11} < a_{22}$; $0 \leqslant a_{13}$.
14. $a_{11} = 2a_{13}$, $a_{11} = 2a_{12}$, $a_{22} \leqslant a_{33}$, $a_{22} \geqslant 2a_{23}$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{12} > 0$; $a_{12} \leqslant 2a_{23}$,
15. $0 = a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{11} + 2a_{13} = 0$, $a_{11} \leqslant a_{22}$, $a_{22} < a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{12} \geqslant 0$.
16. $a_{11} = a_{22}$, $a_{11} = 2a_{12}$, $a_{22} < a_{33}$, $0 < a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$; $a_{13} \leqslant 0$, $a_{13} + a_{23} \geqslant 0$.
17. $a_{12} = 0$, $a_{11} = a_{22}$, $a_{22} > 2a_{23}$, $a_{22} < a_{33}$; $a_{13} \leqslant a_{23}$, $a_{13} \geqslant 0$.
18. $a_{23} = 0$, $a_{22} = a_{33}$, $a_{11} > 2a_{12}$, $a_{11} < a_{22}$; $a_{12} \geqslant a_{13}$, $a_{13} \geqslant 0$.
19. $a_{22} = a_{33}$, $0 \leqslant a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{11} < a_{22}$, $a_{22} = 2a_{23}$; $a_{12} + a_{13} \geqslant 0$, $a_{13} < 0$.
20. $a_{11} = 2a_{12}$, $a_{11} = a_{22}$, $a_{22} = 2a_{23}$, $a_{22} < a_{33}$, $0 = a_{11} + a_{22} - 2a_{12} + 2a_{13} - 2a_{23}$, $a_{11} > 2a_{13}$.

В любой решетке существует единственный в смысле метрики репер, приведенный по Минковскому, метрические параметры которого удовлетворяют одной из выписанных в табл. 1 20 систем. Так, например, в решетке, рассмотренной в примере предыдущего параграфа, таким единственным ее репером служит репер $\{d, -c, b\}$, метрические параметры которого удовлетворяют системе № 9.

Таким образом, для осуществления однозначного приведения достаточно:

1) найти все метрически различные реперы, построенные на последовательных минимумах решетки (см. п. 3);

2) из этих реперов отобрать те, которые удовлетворяют неравенствам Минковского (т. е. те, у которых a_{12} и a_{23} неотрицательны);

3) из реперов, удовлетворяющих неравенствам Минковского, отобрать тот, который удовлетворяет одной из 20 систем неравенств, приведенных в табл. 1.

Отметим, что в теории приведения обычно выписывались неравенства собственно для замыкания фундаментальной области приведения. Тогда любая точка пространства параметров эквивалентна какой-либо точке этого замыкания, а различные точки его ядра не эквивалентны друг другу. Но различные точки границы могут быть и эквивалентны. Осталось обработать и границу, т. е. выделить из нее совокупность таких ее кусков, чтобы никакие две точки этой совокупности уже не были эквивалентны друг другу, но чтобы любая точка пространства параметров была эквивалентна либо внутренней точке этой области, либо точке такого куска. Область приведения с так обработанной границей будем называть абсолютной областью приведения; абсолютизацию области приведения Вороного см. ([8]). В настоящей заметке выписана в виде 20 систем неравенств, найденных М. И. Штогриным, абсолютизированная область приведения Минковского (табл. 1).

Примечание при корректуре. Любым числам a_{11}, a_{22}, a_{33}, a_{12}, a_{13}, a_{23}, удовлетворяющим какой-либо из 20 систем табл. 1, отвечает положительная квадратичная форма $f = a_{11}x_1^2 + a_{22}x_2^2 + a_{33}x_3^2 + 2a_{12}x_1x_2 + 2a_{13}x_1x_3 + 2a_{23}x_2x_3$. Таким образом, абсолютизированная область приведения Минковского, задаваемая этими 20 системами, целиком лежит внутри конуса положительности квадратичных форм.

Математический институт им. В. А. Стеклова
Академии наук СССР
Москва

Поступило
27 XI 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Б. Н. Делоне, УМН, в. 3, 16 (1937); в. 4, 102 (1938). [2] Н. В. Белов, ДАН, **78**, № 1, 55 (1951). [3] Н. В. Белов, Кристаллография, **2**, в. 6, 725 (1957). [4] Л. Азаров, М. Бюргер, Метод порошка в рентгенографии, ИЛ, 1961. [5] Н. В. Белов, Структурная кристаллография, 1951. [6] Б. Н. Делоне, А. Д. Александров, Н. Н. Падуров, Математические основы структурного анализа кристаллов, 1934. [7] H. Minkowski, J. reine u. angew. Math., **129**, 220 (1905). [8] М. И. Штогрин, ДАН, **207**, № 5 (1972).