Доклады Академии наук СССР
1973. Том 210, № 5

УДК 548.1+681.142.2 **КРИСТАЛЛОГРАФИЯ**

В. И. БУРДИНА

СТЕРЕОЭДРЫ ВРАЩЕНИЙ ДВУХ СИНТЕЗОВ ФУНКЦИЙ МЕЖАТОМНЫХ ВЕКТОРОВ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 21 VIII 1972)

Использование кватернионной модели ([1]) вращений позволяет при изучении взаимных расположений двух синтезов функций межатомных векторов ([2]) использовать классический аппарат федоровских групп симметрии ([3, 4]) и, с другой стороны, для каждой группы выделить примитивную область в форме, удобной для практического применения. Проектирование из начала координат в касательную к единичной сфере кватернионов гиперплоскость приводит к «гномоническим» проекциям примитивных областей ([5]), в общем случае стереоэдров ([6, 7]), в виде выпуклых многогранников трех измерений.

Пусть $\mathbf{u} = \cos{}^1/_2\varphi + \mathbf{l}\sin{}^1/_2\varphi = u_0 + u' = u_0 + u_1\mathbf{i} + u_2\mathbf{j} + u_3\mathbf{k}$ — кватернион, изображающий вращение с углом φ и с осью, направленной вдоль единичного вектора $\mathbf{l} = (l_1,\ l_2,\ l_3)$ (в декартовой системе координат ([7])). φ называется фазовым углом кватерниона; в дальнейшем не делается разницы между кватернионом $\mathbf{u}$ и четырехмерным вектором $\mathbf{u} = (u_0,\ u_1,\ u_2,\ u_3)$. Многообразие вращений заполняет единичную трехмерную сферу S^3 кватернионов-вращений $u_0^2 + u_1^2 + u_2^2 + u_3^2 = 1$ с идентифицированными диаметральными точками и топологически представляет трехмерное проективное пространство P^3.

Пусть, далее,

$$\mathbf{u}' = \mathbf{sut} \tag{1}$$

— соответствующее «произведению» $S \times T$ (см. ([2])) кристаллографических поворотов S и T преобразование симметрии, где $\mathbf{s}$ и $\mathbf{t}$ — кватернионы поворотов S и T. Отметим, что произведение двух кватернионов $\mathbf{uv} = (\mathbf{u},\ \mathbf{v}^*) + u_0\mathbf{v}' + v_0\mathbf{u}' + \mathbf{u}' \times \mathbf{v}'$, где $\mathbf{u} = u_0 + \mathbf{u}'$, $\mathbf{v} = v_0 + \mathbf{v}'$, $(\mathbf{u},\ \mathbf{v}^*)$ есть скалярное произведение $\mathbf{u}$ и сопряженного кватерниона $\mathbf{v}^* = v_0 - \mathbf{v}'$, $\mathbf{u}' \times \mathbf{v}'$ — векторное произведение кватернионов-векторов $\mathbf{u}' = u_1 i + u_2 j + u_3 k$ и $\mathbf{v}' = v_1 i + v_2 j + v_3 k$, подсчитываемое по известному правилу.

В векторно-метричных обозначениях соотношение (1) записывается ([2]) в виде $\mathbf{u}' = \pm\mathbf{Zu}$, где 4×4 ортогональная матрица $\mathbf{Z}$ равна произведению $\mathrm{S}\cdot\mathrm{T}$ коммутирующих матриц специального вида.

Пусть

$$\mathbf{u}_i = \mathbf{Z}_i\mathbf{u}_1, \tag{2}$$

$$\mathbf{u}_1,\ \mathbf{u}_2,\ \ldots,\ \mathbf{u}_{2n}, \tag{3}$$

— правильная система точек группы преобразований $G_1 \times G_2$, n — порядок группы, начальная точка $\mathbf{u}_1 = (1,\ 0,\ 0,\ 0)$.

Выделение вращений в примитивную или фундаментальную область удобно вести, используя находящий применение во многих областях исследований принцип максимума, согласно которому в системе (3) эквивалентных кватернионов, расположенных в порядке лексикографического убывания координат выбирается первый кватернион. Получающиеся таким образом области по своей конструкции совпадают со стереоэдрами, описанными Делоне [6]. Действительно, согласно определению, стереоэдр $\mathfrak{U}$ на сфере S^3 с центром в точке $\mathbf{u}_1(1, 0, 0, 0)$ есть геометрическое место точек $\mathbf{u}(u_0, u_1, u_2, u_3)$, для которых ближайшей или одной из ближайших в правильной системе (3) является точка $\mathbf{u}_1$. Поскольку величина расстояния есть инвариант преобразований симметрии (2), легко видеть, что, обратно, расстояние центра $\mathbf{u}_1$ до произвольной точки $\mathbf{u}$ стереоэдра будет минимальным в системе эквивалентных $\mathbf{u}$ точек. Квадрат расстояния $\mathbf{u}_1$ до $\mathbf{u}$ равен $(1-u_0)^2+u_1^2+u_2^2+u_3^2=2(1-u_0)$, поэтому координата u_0 должна быть максимальной из одноименных координат эквивалентных кватернионов. В случае кратного значения $\max u_0$ дальнейший отбор в последующих координатах выделит часть стереоэдра, связанную с другими частями вращениями [5] вокруг центра $\mathbf{u}_1$.

Уравнение гиперплоскости i-й грани стереоэдра, как геометрического места точек, равноудаленных от центра u_1 и от i-ой точки $\mathbf{u}_i$ системы (3), может быть описано скалярным произведением $(\mathbf{u}-{}^1/_2(\mathbf{u}_1+\mathbf{u}_i),\ \mathbf{u}_i-\mathbf{u}_1)=$ $=0$. После элементарных преобразований и перехода к покомпонентной записи с учетом $\mathbf{u}_i=(u_{i0}, u_{i1}, u_{i2}, u_{i3})$ уравнение примет вид

$$u_0(u_{i0}-1)+u_1u_{i1}+u_2u_{i2}+u_3u_{i3}=0. \tag{4}$$

Однородности уравнения (4) соответствует прохождение гиперплоскости через начало координат. Деля обе части уравнения (4) на произведение $u_0(1-u_{i0})$ и полагая

$$v_k=u_k\,/\,u_0, \tag{5}$$

$$n_{i1}=u_{i1}\,/\,(1-u_{i0}),\quad n_{i2}=u_{i2}\,/\,(1-u_{i0}),\quad n_{i3}=u_{i3}\,/\,(1-u_{i0}), \tag{6}$$

приходим к уравнению

$$v_1n_{i1}+v_2n_{i2}+v_3n_{i3}=1. \tag{7}$$

Величины v_1, v_2, v_3 (неоднородные координаты в проективном пространстве P^3) вместе с $v_0=1$ равны координатам точки $\mathbf{v}$ пересечения линии радиуса-вектора Ou с гиперплоскостью V^3, касательной к сфере S^3 в точке $\mathbf{u}_1(1, 0, 0, 0)$. Точка $\mathbf{v}$ называется гномонической проекцией точки $\mathbf{u}$. Уравнение (7) описывает плоскость гномонической проекции i-й грани стереоэдра в $V^3(v_1, v_2, v_3)$. Нормаль $\mathbf{n}_i=(n_{i1}, n_{i2}, n_{i3})$ плоскости (7), совпадает с проекцией нормали $\mathbf{u}_i-\mathbf{u}_1$ гиперплоскости грани.

Стереоэдр $\mathfrak{U}$ в V^3 представляет выпуклый многогранник с центром в начале координат. Следует иметь в виду, что определяемые в малом единственным образом метрикой R^4 расстояния и углы стереоэдра в их «абсолютном» значении, естественно, искажаются при гномоническом проектировании.

Обозначим через p число граней стереоэдра $\mathfrak{U}$ и допустим, что в построении стереоэдра непосредственно заняты первые $p+1$ точек правильной системы (3).

Заметим, что в рассматриваемых стереоэдрах нормали $\mathbf{n}_i$ к плоскостям граней пересекают плоскости в пределах грани, в точках $N_i=\dfrac{1}{1+u_{i0}}(u_{i1},$ $u_{i2}, u_{i3})$. Принимая во внимание выпуклость многогранника, отсюда можно заключить, что проекция нормали ON_i на любую другую нормаль ON_j не превышает длины последней, т. е. $\text{пр}_{ON_j}ON_i\leqslant ON_j$. При $i>p+1$ последние условия нарушаются.

Для координат внутренних и граничных точек стереоэдра выполняются неравенства

$$v_1n_{i1}+v_2n_{i2}+v_3n_{i3}\leqslant 1,\qquad i=2, 3, \ldots, p+1. \tag{8}$$

Поскольку $v_i=u_i\,/\,u_0=\operatorname{tg}{}^1/_2\varphi l_i$, $i=1, 2, 3$, длина вектора $\mathbf{v}$ равна $\operatorname{tg}{}^1/_2\varphi$, направление определяется вектором $\mathbf{l}=(l_1, l_2, l_3)$, численно совпа-

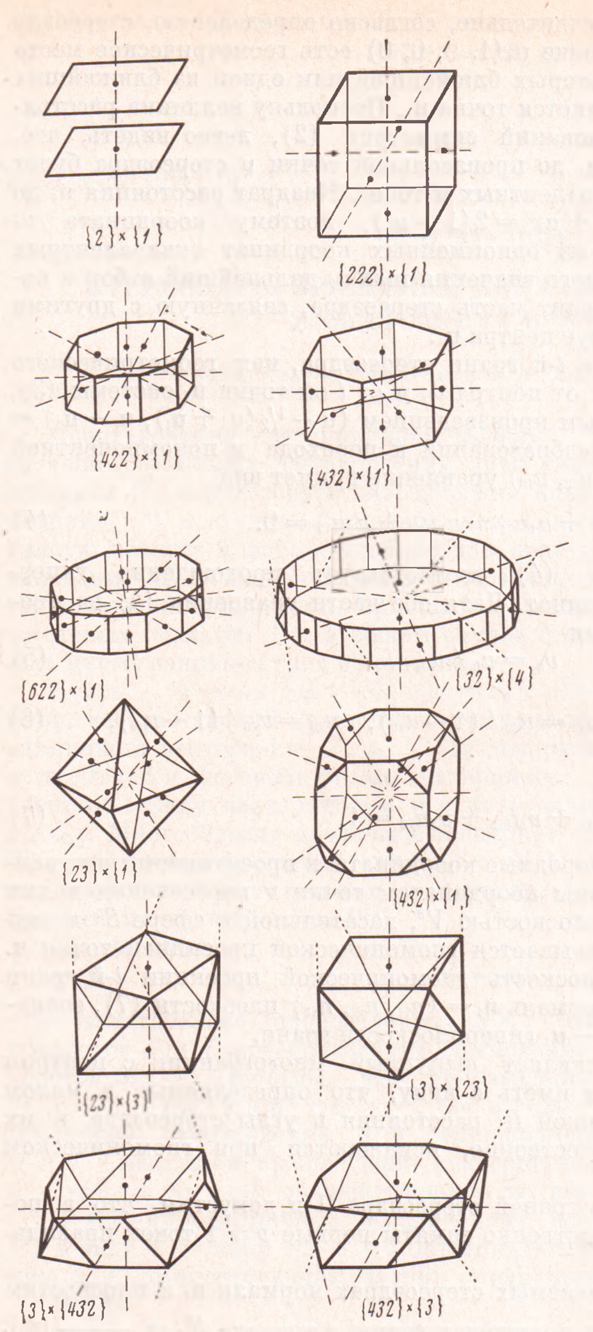

Рис. 1

дающим с направлением оси вращения кватерниона $\mathfrak{u}$, угол φ, $0\leqslant\varphi\leqslant\pi$, совпадает с фазовым углом вращения $\mathfrak{u}$.

При фиксированном направлении $\mathbf{l}$ величина $\operatorname{tg}{}^1/_2\varphi$ для точек стереоэдра заключена в пределах

$$0\leqslant \operatorname{tg}\frac{\varphi}{2}\leqslant \leqslant \min_i \frac{1}{l_1 n_{i1}+l_2 n_{i2}+l_3 n_{i3}}, \qquad (9)$$

где min берется по положительным значениям знаменателя правой части и достигается на грани, встречающей направление $\mathbf{l}$. Конкретный вид неравенств (9) для различных групп симметрии описан в [5].

Грани стереоэдра $\mathfrak{U}$ и примыкающие к граням с внешней стороны области переводятся в другие грани и внутренние области преобразованиями симметрии, в результате которых стереоэдр оказывается в смежном положении.

Преобразование симметрии (2) в V^3 описывается дробно-линейными выражениями

$$v_k' = \frac{u_k'}{u_0'} = \frac{z_{k0}^{(i)} + z_{k1}^{(i)}v_1 + z_{k2}^{(i)}v_2 + z_{k3}^{(i)}v_3}{z_{00}^{(i)} + z_{01}^{(i)}v_1 + z_{02}^{(i)}v_2 + z_{03}^{(i)}v_3}, \qquad (10)$$

$k=1,\ 2,\ 3$. Начало координат $\mathbf{v}=0$ переводится преобразованием (10) в в точку $\mathbf{v}_i = (z_{10}^{(i)}/z_{00},\ z_{20}^{(i)}/z_{00},\ z_{30}^{(i)}/z_{00})$, являющуюся центром смежного по i-й грани стереоэдра. Обратное преобразование с матрицей $\mathbf{Z}_i' = \mathbf{Z}_i^{-1} = \mathbf{Z}_i^T$ возвратит $\mathbf{v}_i$ в начало координат и свяжет i-ю и i'-ю грани стереоэдра.

Для точек i'-й грани величина знаменателя в дробно-линейном преобразовании (10), в силу (7), (6) и (3), постоянна и равна 1, поэтому преобразование смежности на i'-й грани совпадает с линейным:

$$v_k' = z_{k0}^{(i)} + z_{k1}^{(i)}v_1 + z_{k2}^{(i)}v_2 + z_{k3}^{(i)}v_3. \qquad (11)$$

В частном случае преобразования $S \times T$ с одинаковыми направлениями осей $\mathbf{l}_S = \mathbf{l}_T = \mathbf{l}$ нормаль n_i по направлению численно совпадает с направлением $\mathbf{l}$, нормаль $n_{i'}$ эквивалентной грани имеет противоположное направление $-\mathbf{l}$, следовательно, грани параллельны. Легко видеть, что скалярное произведение произвольного вектора $\Delta\mathbf{v}$ i'-й грани и преобразованного согласно (11) вектора $\Delta v'$ равно $(\Delta\mathbf{v}, \Delta v') = \cos {}^1/_2(\varphi_S - \varphi_T)$, где φ_S и φ_T — углы вращений S и T. Таким образом, сходственные грани связаны винтовым движением в направлении $\mathbf{l}$ с углом поворота ${}^1/_2(\varphi_S - \varphi_T)$. Величина сдвига равна $2 \operatorname{tg} {}^1/_4(\varphi_S + \varphi_T)$. Последнее становится ясным также непосредственно из рассмотрений в R^4, если принять во внимание характер ([2]) односторонних преобразований и выражение $\mathbf{u}_{i\,i'} = \cos {}^1/_2(\varphi_S + \varphi_T) \pm \mathbf{l} \sin {}^1/_2(\varphi_S + \varphi_T)$.

Выясним, в каких случаях преобразование симметрии (11) будет сопровождаться вращением эквивалентных граней вокруг общего ребра. При обратном переходе в R^4 оси вращения, перпендикулярной плоскости нормалей, будет отвечать проходящая через начало координат и остающаяся неподвижной плоскость «осей вращения», ортогональная плоскости нормалей $\Delta\mathbf{u}_i = \mathbf{u}_i - \mathbf{u}_1$ и $\Delta\mathbf{u}_{i'} = \mathbf{u}_{i'} - \mathbf{u}_1$, содержащей точки $\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{u}_{i'}$ и «центр» вращения $\mathbf{p} = \mathbf{u}_1 + {}^1/_2(\Delta\mathbf{u}_i + \Delta\mathbf{u}_{i'}) \,/\, (1 + \cos\alpha)$, где α — угол между нормалями.

Если обозначить через $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$ кватернионы искомого преобразования $\mathbf{u}' = \mathbf{x}\mathbf{u}\mathbf{y}$, через $\mathbf{q}$ — кватернион, ортогональный $\mathbf{u}_1$, $\mathbf{u}_i$ и $\mathbf{u}_{i'}$, принадлежащий плоскости осей вращения, то условия преобразования можно записать в виде

$$\mathbf{x}\mathbf{p}\mathbf{y} = \mathbf{p}, \quad \mathbf{x}\mathbf{q}\mathbf{y} = \mathbf{q}, \quad \mathbf{x}\mathbf{y} = \mathbf{u}_i, \quad \mathbf{x}^{-1}\mathbf{y}^{-1} = \mathbf{u}_{i'}. \tag{12}$$

Как показывает подробный анализ, система уравнений (12) сводится к требованию $\varphi_x = \varphi_y$ на фазовые углы кватернионов $\mathbf{x}$ и $\mathbf{y}$. Угол вращения граней, равный $\pi - \alpha$ в метрике R^4 совпадает с общим углом φ кристаллографических вращений.

Среди примитивных областей 121 группы симметрии, описанных в ([5]), насчитывается 12 различных форм стереоэдров, изображенных на рис. 1: образованный двумя параллельными плоскостями диэдр, куб, 6-, 8-, 12- и 24-гранные правильные призмы, октаэдр, кубооктаэдр, а также антипризмы: ломано-деформированные кручением влево и вправо куб и 8-гранная призма. Винтовые оси обозначены штриховыми, поворотные — пунктирными линиями.

Автор благодарит чл.-корр. АН СССР Б. Н. Делоне, а также Н. П. Долбилина, Р. В. Галиулина и М. И. Штогрина за предварительное обсуждение результатов работы.

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

Поступило
1 VIII 1972

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] W. K. Hamilton, Researche Respecting Quaternions, 66, II, Dublin, 1847. [2] В. И. Бурдина, ДАН, 204, № 2, 338 (1972). [3] Е. С. Федоров, Начала учения о фигурах, М.— Л., 1953. [4] Б. Н. Делоне, Изв. АН СССР, сер. VII, № 1—2, 79, 148 (1929). [5] В. И. Бурдина, Кристаллография, 18, 3 (1973). [6] Б. Н. Делоне, Н. И. Сандакова, Тр. Матем. инст. им В. А. Стеклова, 14, 28 (1961). [7] В. И. Бурдина, Кристаллография, 15, 4, 623 (1970). [7] Г. Ф. Вороной. Исследование о примитивных параллелоэдрах, Киев, 1908, стр. 239.