Доклады Академии наук СССР
1973. Том 210, № 1

УДК 548.735.46+513.85 КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Р. В. ГАЛИУЛИН, член-корреспондент АН СССР Б. Н. ДЕЛОНЕ

МАТРИЧНО-ВЕКТОРНЫЙ СПОСОБ РАСШИФРОВКИ ВЕКТОРНЫХ СИСТЕМ

Векторное представление правильных систем точек ([1]) позволяет векторы структуры (совокупности правильных систем точек) с любой федоровской группой симметрии записать в виде одной общей формулы

$$\bar{U} \equiv A_l \bar{x}_i - A_m \bar{x}_j + \mathfrak{S}_{A_l} - \mathfrak{S}_{A_m} \pmod T, \qquad (1)$$

$$l, m = 1, 2, \ldots, h; \quad i, j = 1, 2, \ldots, k,$$

где $\bar{U}$ — вектор структуры; A_l, A_m — матрицы арифметического класса, соответствующего данной федоровской группе; $\mathfrak{S}_{A_l}$, $\mathfrak{S}_{A_m}$ — векторы асимморфизма данной федоровской группы; h — порядок арифметического класса; $\bar{x}_i$, $\bar{x}_j$ — радиус-векторы некоторых точек, задающих i-ю и j-ю правильные системы точек структуры; k — число различных правильных систем точек в структуре.

Давая l, m, i, j все возможные значения, мы получим $(hk)^2$ таких сравнений. Каждому из этих сравнений соответствует (mod T) вектор структуры. Отложив все эти векторы из одной общей точки O и прибавив к ним произвольные векторы t, мы получим векторную систему $\{U\}$, соответствующую данной структуре.

Решим теперь обратную задачу (задачу Патерсона ([2])): как, зная матрицы A арифметического класса и соответствующие им векторы асимморфизма федоровской группы и векторную систему $\{U\}$, найти структуру, т. е. радиус-векторы $\bar{x}_1, \bar{x}_2, \ldots, \bar{x}_k$, задающие правильные системы точек структуры.

Заметим прежде всего, что из $(hk)^2$ уравнений (1) всегда можно выделить hk^2 уравнений таких, что все остальные уравнения им эквивалентны. Действительно, умножим обе части уравнения (1) слева на A_m^{-1}:

$$A_m^{-1}\bar{U} \equiv A_m^{-1}A_l\bar{x}_i - \bar{x}_j + A_m^{-1}\mathfrak{S}_{A_l} - A_m^{-1}\mathfrak{S}_{A_m} \pmod T.$$

Принимая во внимание, что $A_m^{-1}\cdot\bar{U}$ есть также вектор из $\{U\}$, $A_m^{-1}A_l$ — некоторая матрица A_s нашего арифметического класса, $A\mathfrak{S}_B = \mathfrak{S}_{AB} - \mathfrak{S}_A$ (сравнение Фробениуса ([1])) и $\mathfrak{S}_E \equiv 0 \pmod T$, получаем

$$\bar{U} \equiv A_s\bar{x}_i - \bar{x}_j + \mathfrak{S}_{A_s} \pmod T. \qquad (2)$$

Таким образом, для поиска радиус-векторов $\bar{x}_i$ и $\bar{x}_j$ достаточно использовать только hk^2 уравнений вида (2).

Пусть $\bar{U}_1$ — произвольный фиксированный вектор из $\{U\}$. В общем случае он соединяет две точки из различных (i-й и j-й) правильных систем. Следовательно,

$$\bar{U}_1 = \bar{x}_i - \bar{x}_j \quad \text{или} \quad \bar{x}_j = \bar{x}_i - \bar{U}_1. \qquad (3)$$

Подставим (3) в (2):

$$\bar{U} - \bar{U}_1 \equiv A_s\bar{x}_i - \bar{x}_i + \mathfrak{S}_{A_s} \pmod T.$$

Следовательно, для нахождения $\bar{x}_i$ достаточно рассмотреть только $(h-1)$ сравнение:

$$\bar{U}_2' = \bar{U}_2 - \bar{U}_1 \equiv A_2\bar{x}_i - \bar{x}_i + \mathfrak{S}_{A_2} \pmod T,$$

$$\bar{U}_3' = \bar{U}_3 - \bar{U}_1 \equiv A_3\bar{x}_i - \bar{x}_i + \mathfrak{S}_{A_3} \pmod{T},$$
$$\dots\dots\dots\dots\dots \tag{4}$$
$$\bar{U}_h' = \bar{U}_h - \bar{U}_1 \equiv A_h\bar{x}_i - \bar{x}_i + \mathfrak{S}_{A_h} \pmod{T}.$$

Заметим, что в правой части системы (4) стоят векторы, соединяющие точки i-й правильной системы, т. е. векторы из $\{U\}$, а следовательно, и левые разности суть векторы из $\{U\}$. Эти векторы $\overline{U}_2 - \overline{U}_1$, $\overline{U}_3 - \overline{U}_1, \dots$, $\overline{U}_h - \overline{U}_1$ суть такие, которые совпали при перемещении $\{U\}$ относительно исходного положения на вектор $\overline{U}_1$ (суперпозиция по вектору $\overline{U}_1$). Обозначим эту совокупность векторов из $\{U\}$ через $\{U'\}$. Таким образом, подставляя всевозможными способами в левую часть уравнений (4) векторы из $\{U'\}$, мы найдем все правильные системы точек, объединенные вектором $\overline{U}_1'$.

Теперь докажем, что для нахождения $\bar{x}_i$ (следовательно, по (3) и $\bar{x}_j$) достаточно перебрать только те из векторов $\{U'\}$, которые лежат на харкеровских сечениях (в ортогональных дополнениях к инвариантным подпространствам, соответствующих данным преобразованиям симметрии точечной группы) и координаты которых удовлетворяют определенным уравнениям.

Перепишем систему (4) следующим образом:

$$\begin{aligned} (A_2 - E)\,\bar{x}_i &\equiv \bar{U}_2' - \mathfrak{S}_{A_2} \pmod{T},\\ (A_3 - E)\,\bar{x}_i &\equiv \bar{U}_3' - \mathfrak{S}_{A_3} \pmod{T},\\ &\dots\dots\dots\\ (A_h - E)\,\bar{x}_i &\equiv \bar{U}_h' - \mathfrak{S}_{A_h} \pmod{T}. \end{aligned} \tag{5}$$

Обозначим через $\mathfrak{R}$ матрицу порядка $3 \times 3(h-1)$

$$\mathfrak{R} = \begin{pmatrix} A_2 - E \\ A_3 - E \\ \dots \\ A_h - E \end{pmatrix}$$

и приведем ее элементарными преобразованиями к диагональному виду:

$$\mathfrak{R} \to P\mathfrak{R}Q = \begin{pmatrix} e_1 & 0 & 0 \\ 0 & e_2 & 0 \\ 0 & 0 & e_3 \\ & 0 & \end{pmatrix},$$

где не все e_1, e_2, e_3 равны нулю, P — квадратная целочисленная унимодулярная матрица порядка $3(h-1)$, переставляющая строки, а Q — квадратная целочисленная унимодулярная матрица порядка 3, переставляющая столбцы.

Перепишем систему (5) в развернутом виде:

$$P\mathfrak{R}QQ^{-1}\begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \equiv P \begin{pmatrix} u_2' \\ v_2' - \mathfrak{S}_{A_2} \\ w_2' \\ u_3' \\ v_3' - \mathfrak{S}_{A_3} \\ w_3' \\ \dots\dots \\ u_h' \\ v_h' - \mathfrak{S}_{A_h} \\ w_h' \end{pmatrix} \pmod{T}. \tag{6}$$

Число определяемых координат радиус-вектора $\bar{x}_i$ равно рангу матрицы $\mathfrak{R}$. Остальные уравнения системы (6) задают линейную связь между координатами векторов $\{U'\}$.

Замечание. Если в системе (6) вместо $\bar{U}_i'$ подставить $\bar{U}_i - \bar{U}_1$, то мы получим $[3(h-1) - \text{ранг } \mathfrak{R}]$ линейных уравнений, связывающих координаты точек векторной системы $\{U\}$. Для групп триклинной, моноклинной и ромбической сингонии такие уравнения были найдены С. В. Борисовым ([3]). Данный метод позволяет найти эти уравнения для всех федоровских групп и доказывает полноту системы найденных уравнений.

Докажем теперь, что все определяемые координаты радиус-вектора $\bar{x}_i$ для всех федоровских групп, кроме $P1$ и $P\bar{1}$, можно найти из уравнений системы (6).

Теорема. *Если A — матрица, записывающая преобразование симметрии с собственным вектором, собственное значение λ которого равно 1, то $(A-E)$ — вырожденная матрица.*

Действительно, строки матрицы $(A-E)$ можно рассматривать как разность между векторами исходного репера и репера, повернутого преобразованием A. Следовательно, если векторы исходного репера $\mathscr{E}$ являются собственными векторами преобразования A, то в матрице $(A-E)$ появляются строки из нулей. Если же векторы исходного репера $\mathscr{E}'$ не являются собственными векторами преобразования A, то матрица $(A-E)$ вырожденная, так как ранги матриц $(A-E)$ и $C^{-1}(A-E)C$, где C — матрица перехода от репера $\mathscr{E}$ к реперу $\mathscr{E}'$, одинаковы. Следовательно, в трехмерном пространстве в каждом арифметическом классе по крайней мере половина матриц $(A-E)$ вырождена.

Пусть все матрицы $(A_s - E)$, $s = 1, 2, \ldots, h$, вырожденные, т. е. в каждой из этих матриц элементарными преобразованиями строк можно получить нулевую строку. Тогда вектор $\bar{U}_s'$ должен содержаться в харкеровском сечении, соответствующем преобразованию A_s. Таким образом, перебирая все точки $\{U'\}$, попавшие в это харкеровское сечение, находим значения координат радиус-вектора $\bar{x}_i$.

Если не все матрицы $(A_s - E)$ вырожденные, то примем за $(A_2 - E)$ невырожденную матрицу. Тогда координаты вектора $\bar{x}_i$ выразятся только через координаты вектора U_2'. Координаты этого вектора выражаются линейно через координаты точек, расположенных на харкеровских сечениях, соответствующих преобразованиям A_i, обладающих собственными векторами с $\lambda = 1$. Таким образом, все определяемые координаты радиус-вектора $\bar{x}_i$ всегда можно найти.

Из системы (6) следует, что для каждой федоровской группы имеется $[3(h-1) - \text{ранг } \mathfrak{R}]$ уравнений, задающих харкеровские сечения и линейную связь между координатами векторов $\bar{U}_2', \bar{U}_3, \ldots, \bar{U}_h'$. Поэтому из соответствующих харкеровских сечений нужно отбирать только те $\bar{U}'$, координаты которых удовлетворяют этим линейным уравнениям.

Для уменьшения перебора в качестве $\bar{U}_1$ выбирается такой вектор, что в плоскостях и прямых линиях, проведенных через конец этого вектора, параллельно харкеровским сечениям содержится минимальное число точек.

Таким образом, находятся все возможные пары правильных систем, связанные вектором $\bar{U}_1$, и правильные системы, для которых $\bar{U}_1$ является вектором связки.

Возьмем какую-либо из найденных правильных систем точек. Векторы $\bar{U}_E' = 0$, $(\bar{U}_2' - \mathfrak{S}_{A_2}), \ldots, (\bar{U}_h' - \mathfrak{S}_{Ah})$ составляют симморфный пучок изогона ([1,4]), одна из вершин которого совпадает с началом 0 векторной системы. Пусть C — центр этого изогона. Тогда

$$(\overline{OC} = \frac{(\bar{U}_2' - \mathfrak{S}_{A_2}) + (\bar{U}_3' - \mathfrak{S}_{A_3}) + \cdots + (\bar{U}_h' - \mathfrak{S}\mathfrak{S}_{Ah})}{h}$$

Точку C можно принять за начало федоровской группы G искомой основной системы. Из оставшихся после суперпозиции на вектор $\bar{U}_1$ точек векторной системы выделим те, которые образуют правильные системы точек по отношению к группе G с началом в точке C. Искомая основная система вкладывается в так найденные точки.

Таким образом, всякая федоровская группа характеризуется определенным набором уравнений, связывающим координаты точек $\{U'\}$, и уравнениями, выражающими координаты радиус-векторов правильных систем точек через координаты точек $\{U'\}$, расположенных в определенных харкеровских сечениях. Все эти данные для каждой федоровской группы будут приведены в журнале «Кристаллография».

Предлагаемый подход к решению изложенной выше задачи о векторных системах соответствует тем идеям, на которых основывается вывод федоровских групп по Цассенхаузу (5).

Авторы выражают благодарость В. С. Макарову, который принимал участие в этой работе.

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

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

Поступило
29 I 1973

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Р. В. Галиулин, Матрично-векторный способ вывода федоровских групп, 1969. [2] A. L. Patterson, Zs. Kristallogr., **90**, 517 (1935). [3] С. В. Борисов, Кристаллография, 9, 603 (1964). [4] Р. В. Галиулин, Кристаллография, **4**, 701 (1972). [5] H. Zassenhaus, Comment. math. helv., **21**, 117 (1948).