Доклады Академии наук СССР
1975. Том 220, № 4

УДК 548.734

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

В. Г. РАУ, В. В. ИЛЮХИН, Т. Ф. РАУ, Е. Н. КУРКУТОВА,
академик Н. В. БЕЛОВ

О СИМВОЛИЧЕСКОМ МЕТОДЕ ИДЕНТИФИКАЦИИ ПАТЕРСОНОВСКИХ ВЕКТОРОВ

Представим вслед за Бюргером [1] векторную систему (в.с.) в виде совокупности N изображений основной системе (о.с.), отнесенных к одному началу координат. Каждой точке в.с. будет отвечать вектор

$$\mathbf{r}_{st}=\mathbf{r}_t-\mathbf{r}_s, \tag{1}$$

где t и s — символы (индексы) двух точек о.с. Пусть первый символ в $\mathbf{r}_{st}$ будет обозначать номер изображения s_i, а второй t_j отвечает любой точке в каждом отражении, $i, j=1, \ldots, N$.

При проведении различных операций с векторами в в.с. удобно абстрагироваться от них в пользу одних символов: разность двух произвольных векторов в.с.

$$\mathbf{r}_{st}-\mathbf{r}_{xy}=\mathbf{r}_{xyst} \tag{2}$$

может быть представлена в виде $\{xyst\}$, где xy — индекс вычитаемого вектора, а st — индекс некоторого исходного вектора. Таким образом, символ $\{xyst\}$ определяет вектор (отрезок), соединяющий любые две точки в.с., и в общем случае этой четверке индексов может и не отвечать «отрезок» в о.с., т. е. в векторной системе может отсутствовать вектор, равный $\mathbf{r}_{xyst}$ и отложенный от начала координат в.с.

Хорошо известное условие Кокрена [2] о выделении из в.с. единственного изображения, или что то же самое, об отыскании векторов $t_1, \ldots, t_j, \ldots$ $\ldots, t_N$, входящих в одно изображение s_i, $i=1, \ldots, N$, можно записать в виде

$$\{s_i t_m s_i t_n\}; \tag{3}$$

эта скобка получается из (2). Перепишем (2):

$$\mathbf{r}_{x_i y_n s_i t_m}=\mathbf{r}_{s_i t_m}-\mathbf{r}_{x_i y_n}. \tag{2'}$$

Оставляя только индексы изображений или векторов внутри них, получаем для одного изображения (i закреплено)

$$\mathbf{r}_{mn}=\mathbf{r}_{im}-\mathbf{r}_{in}, \tag{4}$$

или в индексной записи от (3) переходим к

$$\{imin\} \tag{4'}$$

здесь на первом и третьем месте — равные индексы. Поскольку (4′) характеризует вектор $\mathbf{r}_{imin}=\mathbf{r}_{mn}$ в i-изображении, то, следовательно, в в.с. должен существовать вектор, проведенный из начала (ii) в точку mn и записываемый через символы — $\{iimn\}$, и, как следствие, выполняется условие

$$\{iimn\}=\{\mathrm{imin}\}. \tag{5}$$

С учетом центросимметричности в.с. условие (5) расширяется до

$$\{imin\}=\{iimn\}=\{nmii\}=\{nimi\}. \tag{5'}$$

Рис. 1 иллюстрирует выполнение этого условия, если принять $i=1$, $m=2$, $n=3$; т. е.

$$\{1213\}=\{3121\}=\{1123\}=\{3211\}. \tag{5''}$$

Уравнение (5′) является частным случаем двух более общих соотношений (также вытекающих из условия (2)), которые отвечают всем разным индексам (см. рис. 1*в*):

$$\{ijkl\}=\{ikjl\}=\{lkji\}=\{ljki\}, \tag{6}$$

$$\{ijlk\}=\{iljk\}=\{klji\}=\{kjli\}. \tag{6′}$$

Таким образом, в в.с. всегда имеется четверка векторов, равных и взаимно параллельных, при этом индексы трех остальных получаем из индексов исходного простым мнемоническим правилом: сначала переставляем местами крайние индексы, а затем меняем местами средние. Эта четверка векторов (6) и (6′) при исходных $\{1234\}$ и $\{1243\}$ отмечена пунктиром на рис. 1*б*.

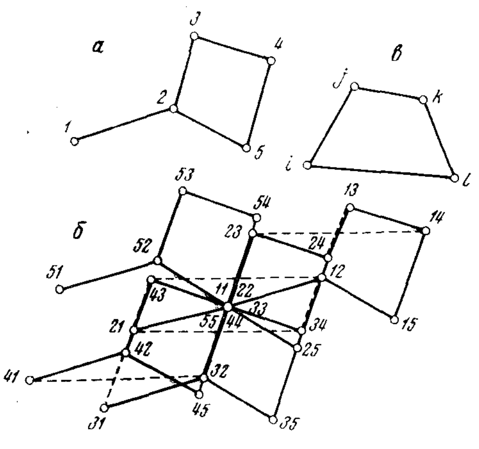

Рис. 1. О.с. из 5 точек (*а*) и отвечающая ей в.с. (*б*). Показаны «мнимые» векторы. *в* – иллюстрация выполнения условий (6) и (6′)

Поскольку в (6) и (6′) все индексы разные, то, следовательно, вектор $\{ijkl\}$ не входит в «изображение», привязанное к началу в.с. (для этого два индекса из четырех должны быть равны); но тогда в о.с. нет соответствующего отрезка и такой вектор вслед за Э. А. Кузьминым [3] следует считать «мнимым». Такие «мнимые» пары векторов между точками векторной системы появляются в ней, когда количество точек о.с. становится больше трех, и число этих пар задается размещениями:

$$A^2_{N-2}=(N-3)(N-2). \tag{7}$$

Отыскание «мнимых» векторов в в.с. весьма просто: выбираем две произвольные точки в.с. и соединяем их. Полученный отрезок используем в качестве вектора сдвига $\mathbf{r}_0$ для построения $M_3(\mathbf{r}_0, \mathbf{r}_0)$. Если в в.с. нет линеек, равных и параллельных $\mathbf{r}_0$ [4], то, следовательно, в о.с. нет отрезка, равного $\mathbf{r}_0$ и, значит, вектор $\mathbf{r}_0$ будет мнимым.

Принципиальная возможность использования «мнимых» векторов в качестве векторов сдвига показана в [3]. Этот же процесс выделения одного изображения (рис. 2) можно осуществить, оперируя лишь одними символами по следующей схеме (рис. 2*в–з*):

1) Выбираем любую пару «мнимых» векторов (рис. 2*в*); для определенности обозначаем их $\{1234\}$ и $\{1243\}$. Согласно (6) и (6′) в в.с. существует еще три пары различных и параллельных векторов (рис. 2*в*)

$$\{1234\}=\{1324\}=\{4321\}=\{4231\},$$

$$\{1243\}=\{1423\}=\{3421\}=\{3241\}.$$

Построением $M_2(\mathbf{r}_{1234})$ и $M_2(\mathbf{r}_{1243})$ фиксируем концы и начала этих векторов и приписываем выделенным точкам в.с. соответствующие индексы: 12, 34, 13, 24, 43, 21, 42, 31, 14, 23, 32, 41. Напомним, что точки с одним одинаковым индексом относятся к одному изображению (например, 11, 12, 13, 14) и часто выделенного фрагмента оказывается достаточно для дальнейшего выделения копии о.с., и тем самым расшифровка функции Патерсона может быть достигнута уже после первого этапа.

2) Добавляем любую следующую «мнимую» пару векторов, выходящих из точки 12, например, $\{12mn\}$ и $\{12nm\}$, где m и n неизвестны. Выделяем сдвигом равные их векторы, концы и начала которых также ин-

дицируем, используя (6) и (6′):

$$\{12mn\}=\{1m2n\}=\{nm21\}=\{n2m1\},$$
$$\{12nm\}=\{1n2m\}=\{mn21\}=\{m2n1\}.$$

Так как m и n не имеют совпадений с уже проиндицированными точками в.с., то им можно приписать произвольные значения, скажем, $m=5$,

Рис. 2. Разложение векторной системы по «мнимому» вектору. *а* – о.с. из 6 точек, *б* – в.с. для рис. 2*а*; *в*–*з* – последовательная идентификация точек в.с.: *в* – первый этап: выбрана исходная пара векторов {1234} и {1243}, *г* – к исходным векторам рис. 2*в* подключены векторы $\{12mn\}$ и $\{12nm\}$; $m=5$, $n=6$; *д* – то же, векторы $\{12kl\}$ и $\{12lk\}$; $k=6$, $l=4$; *е* – то же, векторы $\{12pq\}$ и $\{12qp\}$; $p=5$, $q=4$; *ж* – то же, векторы $\{12fg\}$ и $\{12gf\}$; $f=6$, $g=3$; *з* – то же, векторы $\{12eh\}$ и $\{12he\}$; $e=5$, $h=3$

$n=6$. (На этом этапе мы уже выделили 6 точек одного – первого – «изображения».)

3) Поступаем аналогично предыдущему этапу, т. е. выбираем еще пару векторов:

$$\{12kl\}=\{1k2l\}=\{lk21\}=\{l2k1\},$$
$$\{12lk\}=\{1l2k\}=\{kl21\}=\{k2l1\}.$$

Убеждаемся при этом, что $\{1k2l\}=\{1624\}$ и $\{1l2k\}=\{1426\}$ (последние в обоих случаях соединяют уже ранее проиндицированные точки в.с.) и т. д., т. е. $k=6$, а $l=4$.

Последующие этапы аналогичны.

4) $\{12pq\}=\{1p2q\}=\{1524\}=\ldots$ и т. д., т. е. $p=5$, $q=4$.

5) $\{12fg\}=\{1f2g\}=\{1623\}=\ldots$, т. е. $f=6$, $g=3$.

6) $\{12eh\}=\{1e2h\}=\{1523\}=\ldots$, т. е. $e=5$, $h=3$.

После этого этапа оказываются выделенными все изображения системы, т. е. осуществлена идентификация всех патерсоновских векторов. Отметим, что рассмотренный прием весьма прост и поскольку сводится к несложной перестановке индексов, то его легко реализовать на современных ЭВМ. В пользу его применения говорит и тот факт, что, ввиду «мнимости» векторной пары, вероятность наложений и совпадений векторов в в.с. уменьшается по сравнению с действительными векторами. Идентификация векторов в векторных системах с кратными пиками также возможна, но при этом необходимо согласовывать «мнимые» пары между собой.

Владимирский педагогический институт
им. П. И. Лебедева-Полянского

Поступило
14 X 1974

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

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *М. Бюргер,* Структура кристаллов и векторное пространство, ИЛ, 1961. [2] *W. Cochran,* Acta crystallogr., v. 11, 579 (1958). [3] *Ю. Н. Дроздов, Э. А. Кузьмин и др.,* Сб.: Структура и свойства кристаллов, Владимир, 1974, в. 2. [4] *Э. А. Кузьмин и др.,* ЖСХ, т. 11, 943 (1970).