Доклады Академии наук СССР
1975. Том 220, № 6

УДК 548.734 *КРИСТАЛЛОГРАФИЯ*

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

АНАЛИТИЧЕСКОЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЕ АЛГОРИТМА ОТЫСКАНИЯ ЛИНЕЕК И ПАРАЛЛЕЛОГРАММОВ ВЗАИМОДЕЙСТВИЯ В ФУНКЦИИ ПАТЕРСОНА

Предложенная в ([1]) аналитическая интерпретация этапов расшифровки функции Патерсона позволяет легко и просто отыскать в ней линейки тройки пиков ([2, 3]) и параллелограммы взаимодействия ([4–6]).

1. Пусть в о.с. из N точек для $2L$ точек имеет место *

$$\mathbf{r}_{i_1j_1}=\mathbf{r}_{i_2j_2}=\ldots=\mathbf{r}_{i_kj_k}=\mathbf{r}_{i_lj_l}=\ldots=\mathbf{r}_{i_Lj_L}, \tag{1}$$

тогда в в.с. ([2, 3]) возникнут линейки и L-кратный пик на концах линейки, проходящей через начало. Для выделения линеек необходимо построить вспомогательную функцию выделения M_3 по векторам $\mathbf{r}_{i_1j_1}$ и $2\mathbf{r}_{i_1j_1}$ ([3, 7]).

Согласно ([1]), условия проявления точки mn на M_3 записываем в виде

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{i_1j_1}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_1b_1},\\ 2\mathbf{r}_{i_1j_1}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_2b_2},\end{aligned} \tag{2}$$

где, как и в ([1]) $\mathbf{r}_{a_1b_1}$, $\mathbf{r}_{a_2b_2}$ — любые векторы в.с.

Систему (2) решаем по рецептам ([1, 9, 10]) (см. процедуру (4) в ([1])). Получаем для вектора $\mathbf{r}_{i_kj_k}$ $(\mathbf{r}_{i_lj_l})$

$$\mathbf{r}_{i_kj_k}=\mathbf{r}_{i_kx}-\mathbf{r}_{j_kx}=\mathbf{r}_{xj_k}-\mathbf{r}_{xi_k}=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_kb_k}, \tag{3}$$

$$\mathbf{r}_{i_lj_l}=\mathbf{r}_{i_lx}-\mathbf{r}_{j_lx}=\mathbf{r}_{xj_l}-\mathbf{r}_{xi_l}=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_lb_l}, \tag{3$'$}$$

где k, l пробегают все значения от 1 до L.

При аналогичном разложении вектора $2\mathbf{r}_{i_1j_1}$ возможны два варианта:

1а) в векторной системе нет вектора $\mathbf{r}'=2\mathbf{r}_{i_1j_1}$,

1б) в векторной системе имеет место равенство $\mathbf{r}_{cd}=2\mathbf{r}_{i_1j_1}$.

В первом варианте для вектора $2\mathbf{r}_{i_1j_1}$ получаем

$$\begin{aligned}2\mathbf{r}_{i_1j_1}&=\mathbf{r}_{i_kj_k}+\mathbf{r}_{i_lj_l}=\mathbf{r}_{i_kj_k}-\mathbf{r}_{j_li_l}=\mathbf{r}_{i_lj_l}-\mathbf{r}_{j_ki_k}=\\ &=\mathbf{r}_{i_kj_l}-\mathbf{r}_{j_ki_l}=\mathbf{r}_{i_lj_k}-\mathbf{r}_{j_li_k}=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_2b_2}.\end{aligned} \tag{4}$$

Поскольку индексы k и l независимо пробегают все значения от 1 до L, то (4) можно заменить одним уравнением

$$2\mathbf{r}_{i_1j_1}=\mathbf{r}_{i_kj_l}-\mathbf{r}_{j_ki_l}=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_2b_2} \tag{5}$$

и систему (2) записать как

$$\begin{aligned}\mathbf{r}_{i_1j_1}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_1b_1}=\mathbf{r}_{i_kx}-\mathbf{r}_{j_kx}=\mathbf{r}_{xj_k}-\mathbf{r}_{xi_k},\\ 2\mathbf{r}_{i_1j_1}&=\mathbf{r}_{mn}-\mathbf{r}_{a_2b_2}=\mathbf{r}_{i_kj_l}-\mathbf{r}_{j_ki_l}\end{aligned} \tag{2$'$}$$

* При соблюдении оговорок, указанных в ([3, 7, 8]).

или в сокращенном виде (см. ([1])):

$$\mathbf{r}_{i_l j_l} = \mathbf{r}_{i_k X} - \mathbf{r}_{j_k X} = \mathbf{r}_{X j_k} - \mathbf{r}_{X i_k},$$
$$2\mathbf{r}_{i_l j_l} = \mathbf{r}_{i_k j_l} - \mathbf{r}_{j_k i_l}. \tag{2''}$$

Соответствующая матрица выделения для системы (2″) записывается в виде

$$\begin{pmatrix} i_k X \ (i_l X) & X j_k \ (X j_l) \\ i_k j_l & \end{pmatrix}. \tag{6}$$

Согласно матрице (6), на M_3 фиксируются только точки $i_k j_l$ ($X = j_l$; k, $l = 1, \ldots, L$), отвечающие векторам между отрезками, равными и параллельными исходному, т. е. одноименные концы искомых закономерных линеек.

Для вектора $\mathbf{r}_{cd} = 2\mathbf{r}_{i_l j_l}$ (вариант 1б) система (2″) переписывается следующим образом:

$$\mathbf{r}_{i_k j_k} = \mathbf{r}_{i_k X} - \mathbf{r}_{j_k X} = \mathbf{r}_{X j_k} - \mathbf{r}_{X i_k}$$

или

$$\mathbf{r}_{i_l j_l} = \mathbf{r}_{i_l X} - \mathbf{r}_{j_l X} = \mathbf{r}_{X j_l} - \mathbf{r}_{X i_l},$$
$$\mathbf{r}_{cd} = \mathbf{r}_{cX} - \mathbf{r}_{dX} = \mathbf{r}_{Xd} - \mathbf{r}_{Xc} = \mathbf{r}_{i_k j_l} - \mathbf{r}_{j_k i_l}. \tag{7}$$

И соответственно матрица выделения

$$\begin{pmatrix} i_k X \ (i_l X) & X j_k \ (X j_l) & - \\ i_k j_l & cX & Xd \end{pmatrix}. \tag{8}$$

Из (8) следует, что кроме «закономерных» точек $i_k j_l$ выделяются еще и лишние точки. Действительно, если (при k и l фиксированных, $k \neq l$) положить

$$c = i_k \ (\mathbf{r}_c = \mathbf{r}_{i_k}), \quad d = j_l \ (\mathbf{r}_d = \mathbf{r}_{j_l}), \tag{9}$$

то в обеих строках матрицы (8) появятся общие члены $i_k X$ и $X j_l$, что отвечает выделению на M_3 двух копий о.с.: прямой $i_k X$ и инвертированной $X j_l$. Существование равенств (9) накладывает дополнительные условия на векторы в.с.: из (9) следует, что

$$\mathbf{r}_{cd} = \mathbf{r}_{i_k l} \tag{10}$$

но одновременно

$$\mathbf{r}_{cd} = 2\mathbf{r}_{i_k j_k} = \mathbf{r}_{i_k j_k} + \mathbf{r}_{i_l j_l}. \tag{4'}$$

Совместное выполнение условий (4′) и (10) возможно, только если $j_k = i_l$, т. е. в о.с. должна существовать тройка точек i_k, $j_k = i_l$, j_l (два отрезка $i_k j_k$ и $i_l j_l$, сливаясь своими концами, как бы продолжают друг друга), взаимное расположение которых повторяет линейку векторной системы ([8]); другими словами, должно выполняться равенство

$$\mathbf{r}_{i_k j_l} = 2\mathbf{r}_{i_l j_l}. \tag{11}$$

Это условие ограничивает возможность применения представления в.с. отрезков ([4–6]) при выделении копии о.с. и при переходе к векторным подсистемам ([8]): при выборе $\mathbf{r}_{cd}$ в качестве вектора сдвига получаем две копии о.с., точки которых не отражают взаимного расположения отрезков, т. е. на вспомогательной M_3 возникают дополнительные точки. Этот случай (1б) легко отбраковывается по виду начальной звезды в в.с.

2. Аналогичным образом аналитический подход позволяет получить условия локализации параллелограммов взаимодействия, отвечающих двум кратным пикам кратности L_1 и L_2, иначе двум совокупностям отрез-

ков [11]. Пусть в о.с. из N точек наряду с $2L_1$ точками, подчиняющимися условию (1′), $2L_2$ точек объединяются в L_2 отрезков согласно (12), т. е.:

$$\mathbf{r}_{i_1j_1} = \ldots = \mathbf{r}_{i_kj_k} = \ldots = \mathbf{r}_{i_{L_1-1}j_{L_1-1}}, \tag{1′}$$

$$\mathbf{r}_{i_1'j_1'} = \ldots = \mathbf{r}_{i_l'j_l'} = \ldots = \mathbf{r}_{i'_{L_2-1}j'_{L_2-1}}. \tag{12}$$

Для локализации параллелограммов взаимодействия, отвечающих векторам $\mathbf{r}_{i_1j_1}$ и $\mathbf{r}_{i_1'j_1'}$, необходимо построить три вспомогательных функции M_2: $M_2(\mathbf{r}_{i_1j_1})$, $M_2(\mathbf{r}_{i_1'j_1'})$ и $M_2(\mathbf{r}_0=\mathbf{r}_{i_1j_1}+\mathbf{r}_{i_1'j_1'})$ и суммирующую M_4. Выделение точки mn на M_4 отражается системой трех уравнений

$$\begin{gathered}\mathbf{r}_{i_kj_k} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_1b_1},\\ \mathbf{r}_{i_l'j_l'} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_2b_2},\\ \mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_{i_kj_k} + \mathbf{r}_{i_l'j_l'} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_3b_3}.\end{gathered} \tag{13}$$

Два первых (отвечают $M_2(\mathbf{r}_{i_kj_k})$ и $M_2(\mathbf{r}_{i_l'j_l'})$) переписываются (см. [1]) в виде

$$\begin{gathered}\mathbf{r}_{i_kj_k} = \mathbf{r}_{i_kX} - \mathbf{r}_{j_kX} = \mathbf{r}_{Xj_k} - \mathbf{r}_{Xi_k} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_1b_1},\\ \mathbf{r}_{i_l'j_l'} = \mathbf{r}_{i_l'X} - \mathbf{r}_{j_l'X} = \mathbf{r}_{Xj_l'} - \mathbf{r}_{Xi_l'} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_2b_2}.\end{gathered} \tag{14}$$

При разложении вектора $\mathbf{r}_0$ снова имеем в виду два варианта:

2а) вектор $\mathbf{r}_0$ не совпадает ни с одним из векторов в.с.,

2б) вектор $\mathbf{r}_0$ совпадает с одним из векторов в.с., например $\mathbf{r}_0=\mathbf{r}_{ts}$.

В варианте 2а) для $\mathbf{r}_0$ запишем

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_{i_kj_k} + \mathbf{r}_{i_l'j_l'} = \mathbf{r}_{i_kj_l'} - \mathbf{r}_{j_ki_l'} = \mathbf{r}_{i_l'j_k} - \mathbf{r}_{j_l'i_k} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_3b_3}, \tag{15}$$

где $k=1,\ldots,L_1$, $l=1,\ldots,L_2$.

Соответствующая матрица выделения для совместной системы уравнений (14) и (15) записывается как

$$\begin{pmatrix} i_kX & Xj_k & - & - \\ i_l'X & Xj_l' & - & - \\ i_kj_k & i_l'j_l' & i_kj_l' & i_l'j_k \end{pmatrix}, \tag{16}$$

где X по-прежнему пробегает по всем точкам о.с. от 1 до N. На M_4 выделяются только точки i_kj_l' и $i_l'j_k$, характеризующие векторы между концами выбранных векторов сдвига $\mathbf{r}_{i_kj_k}$ и $\mathbf{r}_{i'_lj'_l}$, т. е. вершины параллелограммов взаимодействия [11, 12].

В варианте 2б) для вектора $\mathbf{r}_{ts}$ получаем

$$\mathbf{r}_0 = \mathbf{r}_{ts} = \mathbf{r}_{tX} - \mathbf{r}_{sX} = \mathbf{r}_{Xs} - \mathbf{r}_{Xt} = \mathbf{r}_{mn} - \mathbf{r}_{a_3b_3} \tag{17}$$

и соответственно матрица для системы уравнений (14) и (17) имеет вид

$$\begin{pmatrix} i_kX & Xj_k & - & - & - & - \\ i_l'X & Xj_l' & - & - & - & - \\ i_kj_k & i_l'j_l' & i_kj_l' & i_l'j_k & tX & Xs \end{pmatrix}. \tag{18}$$

Из (18) следует, что кроме закономерных точек i_kj_l' и $i_l'j_k$ выделяются еще и лишние. Действительно, если положить

$$t=i_k=i_l', \quad s=j_k=j_l' \tag{19}$$

(k, l фиксированы), то на функции M_4 выделяются две дополнительных копии о.с.— i_kX и Xj_l', т. е. этот случай характеризуется систематическим образованием ложных параллелограммов.

Из условия (19) следует, что

$$\mathbf{r}_{ts} = \mathbf{r}_{i_k j_l'} = \mathbf{r}_{i_l' j_k}, \tag{20}$$

а поскольку имеет место

$$\mathbf{r}_{ts} = \mathbf{r}_{i_k j_k} + \mathbf{r}_{i_l' j_l'}, \tag{21}$$

то совместное выполнение равенств возможно лишь при $j_k = i_l'$, т. е. в основной системе должен существовать параллелограмм, построенный на двух исходных векторах (что и приводит к возникновению «ложных» параллелограммов в векторной системе). Эта ситуация может быть отбракована по наличию параллелограмма в начальной звезде векторной системы.

Горьковский государственный университет
им. Н. И. Лобачевского

Поступило
25 X 1974

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

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] *Э. А. Кузьмин, Ю. Н. Дроздов и др.*, ДАН, т. 220, № 3 (1975). [2] *Э. А. Кузьмин и др.*, Кристаллография, т. 14, 1059 (1969). [3] *Э. А. Кузьмин и др.*, ЖСХ, т. 11, 943 (1970). [4] *В. П. Головачев*, Автореф. канд. дисс., М., 1970. [5] *С. В. Борисов и др.*, Сб.: Проблемы кристаллографии, М., 1971. [6] *Э. А. Кузьмин и др.*, ДАН, т. 207, 1106 (1972). [7] *Э. А. Кузьмин и др.*, ЖСХ, т. 12, 643 (1971). [8] *Э. А. Кузьмин и др.*, там же, т. 14, 673 (1973). [9] *Э. А. Кузьмин и др.*, ДАН, т. 196, 1080 (1971). [10] *Э. А. Кузьмин и др.*, Сб.: Структура и свойства кристаллов, Владимир, 1974. [11] *Э. А. Кузьмин и др.*, ДАН, т. 209, 344 (1973). [12] *Э. А. Кузьмин и др.*, ДАН, т. 206, 343 (1972).