

В. И. БУРДИНА

ПРЕОБРАЗОВАНИЯ СИММЕТРИИ МНОГООБРАЗИЯ ВРАЩЕНИЙ

(Представлено академиком Н. В. Беловым 4 XI 1974)

В настоящей работе в продолжение ^(1, 2) рассматриваются представляющие интерес при решении кристаллографических задач ⁽³⁾ преобразования симметрии многообразия трехмерных вращений.

Из всех произведений $P_1(L_1) \times P_2(L_2)$ псеворотных осей $P_i(L_i)$, $i=1, 2$ (P_i — порядок, L_i — единичный вектор оси), описывающих преобразования симметрии на многообразии вращений, разбираются произведения $P(L) \times E$ и $E \times P(E)$, где E — единица или тривиальное вращение, и произведение $P(L_1) \times P(L_2)$ одноименных осей.

Рассмотрим левое произведение

$$P(L) \times E, \quad (1)$$

где вращение $P(L)$ описывается кватернионом $p = \cos \frac{1}{2}\Phi + L \sin \frac{1}{2}\Phi = p_0 + p_1 i + p_2 j + p_3 k$ с фазой $\frac{1}{2}\Phi = \pi/P$, $0 \leq \Phi \leq \pi$. В пространстве R^4 кватернионов произведению (1) отвечает преобразование

$$u' = pu, \quad (2)$$

где $u = u_0 + u_1 i + u_2 j + u_3 k$, $u' = u'_0 + u'_1 i + u'_2 j + u'_3 k$, или в векторно-матричной форме

$$u' = Su; \quad (3)$$

матрица S описана в ⁽⁸⁾, стр. 339).

Полная группа преобразований (1), очевидно, изоморфна группе трехмерных вращений; матрицы S из (3) описывают линейное представление (см. ⁽⁴⁻⁷⁾) группы вращений степени 4. Характер представления $\chi = 4p_0 = 4 \cos \frac{1}{2}\Phi$ равен взятому с коэффициентом 2 характеру $2 \cos \frac{1}{2}\Phi$ неприводимого представления степени 2 группы вращений (см. ⁽⁷⁾, стр. 39). Согласно общей теории представлений (см. ⁽⁴⁾; ⁽⁵⁾, стр. 331) отсюда вытекает, что матричное представление $\{S\}$ в комплексной области распадается на два неприводимых представления степени 2. Преобразование (3) сводится к двум независимым вращениям в ортогональных плоскостях π_1 и π_2 с одним и тем же углом поворота $\frac{1}{2}\Phi$, равным половине угла исходного вращения $P(L)$.

Поскольку согласно (2) при $u=1$ имеем $u' = p = \cos \frac{1}{2}\Phi + L \sin \frac{1}{2}\Phi$, а при $u=L$ $u' = pL = -\sin \frac{1}{2}\Phi + L \cos \frac{1}{2}\Phi$, кватернионы 1 и L будут определять одно из упомянутых двумерных инвариантных подпространств — плоскость вращения π_1 ; в системе ортов $1, L$ вращение происходит против часовой стрелки. Вторая плоскость π_2 вращения, будучи ортогональна скаляру 1 , целиком располагается в «векторном» подпространстве R^3 пространства R^4 ортогонально вектору L , относительно которого вращение происходит также против часовой стрелки.

При проективном переходе к касательному пространству $V^3(v_1, v_2, v_3)$ неоднородных координат $v_i = u_i/u_0$, $i=1, 2, 3$, плоскость вращения π_1 отобразится в проходящую через начало координат «скользящую» прямую направления L (рис. 1). Вторая плоскость π_2 исчезает в бесконечности, поскольку содержит только ортогональные скаляру 1 направления. Вращение в π_2 действует в V^3 как вращение вокруг оси L , поскольку каждая ортогональная L плоскость, будучи в R^4 ортогональна также 1 , параллельна π_2 .

Преобразование (2) в V^3 : $\mathbf{v}' = \mathbf{u}'/u_0'$, где $\mathbf{u}'$ — векторная часть кватерниона $\mathbf{u}' = u_0' + u_i \mathbf{i}$ описывается дробно-линейным выражением

$$\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v} \cos \frac{1}{2}\Phi + \mathbf{L} \sin \frac{1}{2}\Phi + (\mathbf{L} \times \mathbf{v}) \sin \frac{1}{2}\Phi}{\cos \frac{1}{2}\Phi - v_L \sin \frac{1}{2}\Phi}; \quad (4)$$

здесь $\mathbf{v} = \mathbf{u}/u_0$, $v_L = (\mathbf{v}, \mathbf{L})$ — величина проекции радиуса-вектора $\mathbf{v}$ на направление $\mathbf{L}$. Выделяя в правой части (4) поворот вокруг оси $\mathbf{L}$ на угол $\frac{1}{2}\Phi$,

$$\mathbf{v}_\perp' = \mathbf{v}_\perp \cos \frac{1}{2}\Phi + (\mathbf{L} \times \mathbf{v}_\perp) \sin \frac{1}{2}\Phi, \quad (5)$$

где $\mathbf{v}_\perp$, $\mathbf{v}_\perp'$ — проекции векторов $\mathbf{v} = \mathbf{v}_L + \mathbf{v}_\perp$ и $\mathbf{v}' = \mathbf{v}_L' + \mathbf{v}_\perp'$ на ортогональную $\mathbf{L}$ плоскость соответственно, представим последующие действия в форме

$$\mathbf{v}' = \frac{\mathbf{v}_L \cos \frac{1}{2}\Phi + \mathbf{L} \sin \frac{1}{2}\Phi + \mathbf{v}_\perp'}{\cos \frac{1}{2}\Phi - v_L \sin \frac{1}{2}\Phi}. \quad (6)$$

Выражение (6) описывает в V^3 вызванное плоскостью π_1 «скольжение» вдоль направления $\mathbf{L}$. Абсолютная величина смещения произвольной точки согласно (6)

$$\Delta v_L = |\mathbf{v}_L' - \mathbf{v}_L| = (1 + v_L^2) / (\operatorname{ctg} \frac{1}{2}\Phi - v_L) \quad (7)$$

постоянна для сечений $v_L = \text{const}$, ортогональных $\mathbf{L}$.

Таким образом, одностороннее преобразование $\mathbf{P}(\mathbf{L}) \times \mathbf{E}$ действует в V^3 как проходящая через начало координат «винтовая ось» направления $\mathbf{L}$.

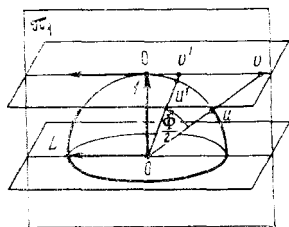


Рис. 1

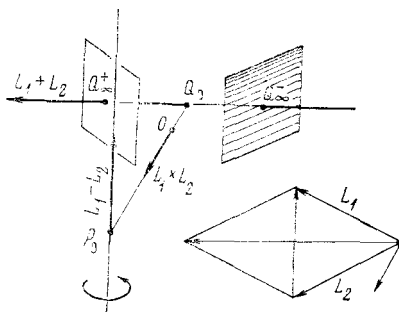


Рис. 2

Величина Δv_L сдвига вдоль $\mathbf{L}$ постоянна для нормальных сечений $v_L = \text{const}$, угол поворота равен $\frac{1}{2}\Phi$. В нормальных сечениях, кроме сечения $v_L = -\operatorname{tg} \frac{1}{4}\Phi$ — плоскость грани стереоэдра (см. (1)), действует растяжение или сжатие в $1/|\cos \frac{1}{2}\Phi - v_L \sin \frac{1}{2}\Phi|$ раз. При $v_L > \operatorname{ctg} \frac{1}{2}\Phi$ дополнительно действует центр инверсии; сечение $v_L = \operatorname{ctg} \frac{1}{2}\Phi$ переводится в бесконечность.

Правостороннее произведение $\mathbf{E} \times \mathbf{P}(\mathbf{L})$ описывается в R^4 преобразованием кватернионов $\mathbf{u}' = \mathbf{u}\mathbf{p}$, где $\mathbf{p}$ — кватернион вращения $\mathbf{P}(\mathbf{L})$, или линейным векторно-матричным преобразованием

$$\mathbf{u}' = \mathbf{T}\mathbf{u} \quad (8)$$

(см. (8), стр. 339). Соответствующее дробно-линейное преобразование $\mathbf{v}' = (\mathbf{v} \cos \frac{1}{2}\Phi + \mathbf{L} \sin \frac{1}{2}\Phi - (\mathbf{L} \times \mathbf{v}) \sin \frac{1}{2}\Phi) / (\cos \frac{1}{2}\Phi - v_L \sin \frac{1}{2}\Phi)$ отличается от (4) знаком минус перед векторным произведением в правой части. Картина действия (8) аналогична. Отличие состоит в том, что направления вращения в плоскости π_2 и поворот относительно оси $\mathbf{L}$ в V^3 меняются на обратные.

Рассмотрим произведение

$$\mathbf{P}(\mathbf{L}_1) \times \mathbf{P}(\mathbf{L}_2) \quad (9)$$

двух одноименных поворотных осей $P(L_1)$ и $P(L_2)$ с общим углом поворота $\Phi = 2\pi/P$, описываемых кватернионами $s = \cos \frac{1}{2}\Phi + L_1 \sin \frac{1}{2}\Phi$ и $t = \cos \frac{1}{2}\Phi + L_2 \sin \frac{1}{2}\Phi$. Соответствующее преобразование в R^4 (см. (8))

$$u' = sut \quad (10)$$

в векторно-матричной форме имеет вид

$$u' = Zu, \quad (11)$$

Матрица $Z = S \cdot T = T \cdot S$, равная произведению коммутирующих матриц S и T , определяемых выражениями (3) и (8) соответственно при $p=s$ и при $p=t$, может быть представлена в форме

$$Z = \cos^2 \frac{1}{2}\Phi E + \sin^2 \frac{1}{2}\Phi Z_1 + \cos \frac{1}{2}\Phi \sin \frac{1}{2}\Phi Z_2, \quad (12)$$

где E — единичная матрица,

$$Z_1 = \begin{pmatrix} (L_1, L_2)_0 & (L_1 \times L_2)_1 & (L_1 \times L_2)_2 & (L_1 \times L_2)_3 \\ (L_1 \times L_2)_1 & (L_1, L_2)_1 & \delta_3 & \delta_2 \\ (L_1 \times L_2)_2 & \delta_3 & (L_1, L_2)_2 & \delta_1 \\ (L_1 \times L_2)_3 & \delta_2 & \delta_1 & (L_1, L_2)_3 \end{pmatrix},$$

$$Z_2 = \begin{pmatrix} 0 & -(L_1 + L_2)_1 & -(L_1 + L_2)_2 & -(L_1 + L_2)_3 \\ (L_1 + L_2)_1 & 0 & -(L_1 - L_2)_3 & (L_1 - L_2)_2 \\ (L_1 + L_2)_2 & (L_1 - L_2)_3 & 0 & -(L_1 - L_2)_1 \\ (L_1 + L_2)_3 & -(L_1 - L_2)_2 & (L_1 - L_2)_1 & 0 \end{pmatrix} \quad (13)$$

Z_1 и Z_2 — симметричная и кососимметричная матрица соответственно. Здесь $(L_1 + L_2)_k$, $(L_1 - L_2)_k$, $(L_1 \times L_2)_k$, $k=1, 2, 3$, — элементы суммы, разности и векторного произведения векторов $L_1 = L_{11}i + L_{12}j + L_{13}k$ и $L_2 = L_{21}i + L_{22}j + L_{23}k$. Диагональные элементы матрицы Z_1 равны

$$(L_1, L_2)_r = - \sum_{k=1}^{k=3} L_{1k} L_{2k} (-1)^{\delta(k-r)}, \quad r=0, 1, 2, 3,$$

где $\delta(i)=1$ при $i=0$ и $\delta(i)=0$ в противном случае; величины $\delta_{m_1} = -(L_{1m_2} L_{2m_3} + L_{1m_3} L_{2m_2})$, где m_1, m_2, m_3 равны 1, 2, 3 либо перестановке этих чисел.

Произведение (9) можно рассматривать как элемент кронекеровского произведения полных групп вращений, между элементами которых установлена изоморфная зависимость, связывающая векторы L_1 и L_2 . Поскольку кронекеровское произведение изоморфно любой из групп сомножителей, представление (11)–(13) совпадает с представлением группы вращений. Равный сумме следов трех матриц (12) характер представления $\chi = 4 \cos^2 \frac{1}{2}\Phi = 2 + 2 \cos \Phi = \chi_1 + \chi_3$ разлагается в сумму характеров $\chi_1=1$ и $\chi_3=1+e^{i\Phi}+e^{-i\Phi}$ неприводимых представлений группы вращений степени 1 и 3 (см. (7), стр. 39). Отсюда вытекает, что представление (11)–(13) распадается в комплексной области на два неприводимых представления тех же степеней 1 и 3. Каждое преобразование (11) будет характеризоваться наличием в R^4 плоскости вращения с углом поворота Φ и ортогональной плоскости, остающейся неподвижной.

Заметим, что приводимость представления (13) следует также из наличия условия коммутируемости матриц S и T (см. [6], стр. 250).

Легко видеть, что при $L_1 \neq \pm L_2$ кватернионы

$$p_1 = L_1 - L_2, \quad p_2 = 1 + (2/|L_1 - L_2|^2) L_1 \times L_2, \quad (14)$$

остаются неизменными при действии преобразований (11)–(13), следовательно, определяемое кватернионами (14) двумерное линейное подпро-

странство инвариантно и неподвижно относительно преобразования. Далее, кватернионы

$$q_1 = L_1 + L_2, \quad q_2 = -1 + \frac{2}{(L_1 + L_2)^2} L_1 \times L_2, \quad (15)$$

ортогональные кватернионам p_1 и p_2 , согласно изложенным выше соображениям, будут определять плоскость вращения на угол Φ . В системе (15) вращение происходит против часовой стрелки.

Таким образом, *равное произведению $P(L_1) \times P(L_2)$ одноименных осей преобразование симметрии многообразия вращений, представляет в R^4 вращение в плоскости с углом поворота равным общему углу вращений. Остающаяся неподвижной плоскость и плоскость вращения описываются кватернионами (14) и (15).*

В частном случае $L_1 = -L_2 = L$ двух взаимно обратных вращений кватернионы неподвижной плоскости равны $p_1 = 2L$, $p_2 = 1$, ортогональная плоскость вращения целиком располагается в «векторном» пространстве R^3 . Таким образом, преобразование $u' = sus^{-1}$ совпадает с вращением $P(L)$ в R^3 — известная теорема вращений Гамильтона (см. ⁽⁹⁾, стр. 268).

В другом частном случае при $L_1 = L_2 = L$ имеем преобразование $u' = sus$, описывающее вращение в плоскости кватернионов $q_1 = 2L$ и $q_2 = -1$, — ортогональная направлению L неподвижная плоскость целиком располагается в R^3 .

При переходе от R^4 к координатному пространству $V^3(v_1, v_2, v_3)$ гномонической проекции неподвижная плоскость векторов (14) проектируется в прямую — «ось вращения» порядка P , параллельную направлению $L_1 - L_2$ и проходящую через точку P_0 , описываемому в R^4 кватернионом p_2 , а в V^3 — радиус-вектором $OP_0 = 2(L_1 \times L_2) / |L_1 - L_2|^2$, нормальным «оси вращения». Расстояние «оси вращения» от начала координат $OP_0 = \text{ctg}(\widehat{L_1 L_2}/2)$. Плоскость векторов (15) проектируется в «скользящую прямую» ортогонального направления $L_1 + L_2$, проходящую через точку Q_0 , с радиус-вектором $OQ_0 = -2|L_1 \times L_2| / |L_1 + L_2|^2$, расположенную на той же нормали $L_1 \times L_2$ в противоположном направлении от начала координат и на обратном расстоянии $OQ_0 = \text{tg}(\widehat{L_1 L_2}/2)$ (рис. 2).

Заметим, что расположение оси вращения и линии скольжения не зависит от величины угла Φ поворота.

Определяемая по условию $u_0' = 0$ из (11) — (13) плоскость

$$(L_1 \times L_2 - \text{ctg } 1/2 \Phi (L_1 + L_2), v) = (L_1, L_2) - \text{ctg}^2 1/2 \Phi \quad (16)$$

переводится в V^3 преобразованием (10) в бесконечность. Часть пространства V^3 , расположенная в направлении $L_1 + L_2$ от плоскости (16), перейдет в полупространство, расположенное в направлении $-(L_1 + L_2)$ от плоскости

$$(L_1 \times L_2 + \text{ctg } 1/2 \Phi (L_1 + L_2), v) = (L_1, L_2) - \text{ctg}^2 1/2 \Phi, \quad (17)$$

определяемой из обратного преобразования по условию $u_0' = 0$.

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

Поступило
10 X 1974

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

- ¹ В. И. Бурдина, ДАН, т. 210, № 5, 1082 (1973). ² В. И. Бурдина, Кристаллография, т. 18, № 4, 694 (1973). ³ The Molecular Replacement Method, by M. G. Rossmann, N. Y. — London — Paris, 1971. ⁴ Л. С. Понтрягин, Непрерывные группы, М., 1954. ⁵ Д. П. Желобенко, Компактные группы Ли и их представления, «Наука», 1970. ⁶ В. И. Смирнов, Курс высшей математики, т. 3, ч. 2, М., 1954. ⁷ И. М. Гельфанд, Р. А. Минлос, Э. Я. Шапиро, Представления группы вращений, М., 1958. ⁸ В. И. Бурдина, ДАН, т. 204, № 2 (1972). ⁹ W. R. Hamilton, Lectures in Quaternions, 1853.