УДК 548.1.02:548.713

ТРАНСЛЯЦИОННО-СОВМЕСТИМЫЕ МНОГОГРАННИКИ ДИРИХЛЕ-ВОРОНОГО ДЛЯ РАЗЛИЧНЫХ ОРИЕНТАЦИЙ ОСЕЙ ГОЛОЭДРИЙ

А. С. Поплавной, Р. И. Филиппов

Работа выполнена при поддержке целевой программы “Развитие научного потенциала высшей школы (2009-2010 гг.), проект 2.1.1.1230”.

Представлен способ решения задачи о построении трансляционно-совместимых многогранников Дирихле-Вороного, отвечающих подрешеткам сложных кристаллических соединений. С использованием параметров Зеллинга эта задача сводится к задаче линейного программирования, которая может быть решена на персональном компьютере при условии ограничений на величину отношения объемов трансляционно-совместимых многогранников. Получены частные решения для кубической и тетрагональной систем, отвечающие различным ориентациям реперов Браве и сортов многогранников.

A way of solving problem concerning a construction of translational-compatible Dirichlet-Voronoi polyhedra corresponding to complex crystal compound sublattices has been developed. By using the Zelling parameters one accomplishes a problem of linear programming which can be solved by means of a personal computer on condition that a value of relation of translational-compatible polyhedra volume is restricted. Particular solutions for cubic and tetragonal systems characteristic of various orientations of holohedral axes have been found.

Ключевые слова: решетки Браве, трансляционно-совместимые подрешетки, многогранники Дирихле-Вороного, линейное программирование.

Многогранники Дирихле-Вороного (МДВ) или зоны Бриллюэна (ЗБ) используются при решении многих задач кристаллографии, кристаллофизики и кристаллохимии. Для определения сорта МДВ(ЗБ) принято использовать известный алгоритм Делоне [1]; комбинаторно-симметрийная классификация этих многогранников представлена в статье [2]. С областью Дирихле решетки принято связывать приведенный четырехсторонник этой решетки, называемый основным четырехсторонником Зеллинга. Этот четырехсторонник определяется приведенными параметрами Зеллинга, которые являются геометрическими константами решетки [1].

Сказанное относится к простым решеткам. Сложная кристаллографическая структура может быть представлена как совокупность вложенных подрешеток, представляющих собой решетки Браве [3]. Такое представление оказалось продуктивным при исследовании особенностей спектров элементарных возбуждений сложных кристаллов [4], в том числе колебательных спектров [5]. Методы исследования, представленные в [3], [4], [5], предполагают построение трансляционно-совместимых МДВ и соответствующих им ЗБ. Это необходимо при теоретико-групповом анализе симметрии каждой подрешетки и кристалла в целом, в частности, при перестройке ЗБ подрешеток в ЗБ кристалла, разложении соответствующих неприводимых звезд представлений и групп точечных симметрий.

В настоящей работе нами представлен метод построения трансляционно-совместимых МДВ(ЗБ), отвечающих подрешеткам сложных кристаллических соединений.

При построении сложных кристаллических структур из подрешеток Браве необходимо наложить на последние требование трансляционной совместимости. Пусть $(\vec{a},\vec{b},\vec{c})$ и $(\vec{A},\vec{B},\vec{C})$ реперы двух решеток Браве. Эти решетки будут трансляционно совместимы при условии, если они связаны между собой посредством матрицы $M = n_{ij}$ с целочисленными коэффициентами:

$$\begin{pmatrix} \vec{A} \\ \vec{B} \\ \vec{C} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} n_{11} & n_{12} & n_{13} \\ n_{21} & n_{22} & n_{23} \\ n_{31} & n_{32} & n_{33} \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} \vec{a} \\ \vec{b} \\ \vec{c} \end{pmatrix}. \tag{1}$$

Матрицу M будем называть матрицей трансляционной совместимости [3]. Если $det(M) = 1$, то обе решетки полностью совпадают, в противном случае, определитель матрицы M показывает отношение объемов их элементарных ячеек.

Сорт решетки определяется как симметрико-топологическая характеристика ее МДВ [1]. Принадлежность решетки к тому или иному из 24 сортов можно определить на основе анализа ее параметров Зеллинга (g,h,k,l,m,n), которые определяются как скалярные произведения между векторами $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$ и $\vec{d} = -(\vec{a}+\vec{b}+\vec{c})$:

$$g = (\vec{b},\vec{c}) \quad h = (\vec{a},\vec{c}), \quad k = (\vec{b},\vec{a}),$$
$$l = (\vec{a},\vec{d}), \quad m = (\vec{b},\vec{d}), \quad n = (\vec{c},\vec{d}).$$

Особенностью таблицы является то, что сумма элементов в каждой ее строчке равна нулю. Параметры Зеллинга считаются приведенными, если выполняется условие

$$g,h,k,l,m,n \le 0. \tag{2}$$

В работе [1] даны условия на приведенные параметры Зеллинга для всех возможных 24 сортов. Выполнение этих условий необходимо и достаточно для принадлежности кристалла к тому или иному сорту.

Предположим, что решетки с реперами $(\vec{a},\vec{b},\vec{c})$ и $(\vec{A},\vec{B},\vec{C})$ относятся к определенным сортам и отношение объемов их элементарных ячеек невелико. Это означает, что $det(M)$ не превышает некоторого целого числа. Исключим также случай больших значений n_{ij}, что приведет к конечному множеству матриц трансляционной совместимости.

Тогда количество систем уравнений вида (1) будет конечным. В качестве решения каждой из систем будут выступать некоторые возможные реперы $(\vec{a}_0,\vec{b}_0,\vec{c}_0)$ и $(\vec{A}_0,\vec{B}_0,\vec{C}_0)$, такие, что для них будет выполняться условие трансляционной совместимости, заданной матрицей M.

Переведем условие (1) на язык параметров Зеллинга. Для этого вычислим попарные произведения векторов $\vec{A},\vec{B},\vec{C},\vec{D}$:

$$\begin{cases} G=(\vec{B},\vec{C}) & = n_{21}n_{31}a^2+n_{21}n_{32}k+n_{21}n_{33}h+ \\ & +n_{22}n_{31}k+n_{22}n_{32}b^2+n_{22}n_{33}g+ \\ & +n_{23}n_{31}h+n_{23}n_{32}g+n_{23}n_{33}c^2 \\ \dots \\ N=(\vec{C},\vec{D})=\dots \\ \dots \end{cases} \tag{3}$$

Множители $a^2,b^2,c^2,$ можно преобразовать по следующему свойству:

$$\begin{aligned} a^2 &= -(k+h+l), \\ b^2 &= -(k+g+m), \\ c^2 &= -(l+m+n). \end{aligned} \tag{4}$$

В результате в системе (3), которая состоит из шести уравнений, будут присутствовать только значения из матрицы трансляционной совместимости и параметры Зеллинга обеих решеток Браве.

Добавим к (3) условия на сорт. Будем добавлять условия таким образом, чтобы (3) трансформировалась в задачу линейного программирования. Возможны следующие варианты:

1) $g=h$ – два параметра равны друг другу:

a) если равны параметры для решетки с репером $\vec{A},\vec{B},\vec{C}$, то добавим дополнительное уравнение: $X=G-H=\sum(n_{ab}n_{a'b'}-n_{xy}n_{x'y'})g_i$,

где g_i – условное обозначение для параметров Зеллинга $(g_1=g,\ g_2=h,\dots)$ и потребуем выполнения условия $X=0$;

b) если равны некоторые параметры g_i,g_j для решетки с репером $\vec{a},\vec{b},\vec{c}$, то добавим уравнение $X=g_i-g_j=0$ для соответствующих параметров Зеллинга.

2) $g<0$ и $g=0$ – такие условия просто добавляются к системе.

После добавления условий система все еще будет иметь бесконечно много решений относительно неизвестных g,h,k,l,m,n. Для выделения частного решения добавим минимизирующую функцию:

$$f_{min}=g+h+k+l+m+n.$$

В общем виде задача линейного программирования запишется как:

$$\begin{array}{rr} & g_n=0 \quad \cdots \quad g_p<0 \\ G_i=0 & G_i=\sum n_{xy}n_{x'y'}g_j \\ G_k<0 & G_k=\sum n_{xy}n_{x'y'}g_j \\ X_l=0 & X_l=\sum(n_{ab}n_{a'b'}-n_{xy}n_{x'y'})g_j \\ X_m=0 & X_m=g_a-g_b \end{array}$$

(5)

$$2cf_{min}=g+h+k+l+m+n.$$

Далее эта задача записывается для конкретных сингоний и сортов решеток.

Решетки кубической сингонии

Рассмотрим решетки Браве, которые относятся к трем возможным сортам кубической сингонии. Рассмотрим полученные результаты в зависимости от сорта решетки $(\vec{a},\vec{b},\vec{c})$.

Наибольшее количество дополнительных уравнений в задаче линейного программирования оказывается в случае совмещения двух объемноцентрированных кубических решеток. Система будет состоять из 16 уравнений (6 основных, для выполнения условия трансляционной симметрии, и 10 дополнительных для выполнения условий для сортов). Ограничимся значениями $-3\le n_{ij}\le 3$ для элементов матрицы трансляционной совместимости. При таких ограничениях получаем $7^9=40353607$ матриц и столько же задач линейного программирования.

Частные решения уравнений (5) искались для случаев разных сочетаний сортов KI, KIII, KV кубической сингонии. Тривиальными решениями для сочетаний KI-KI, KIII-KIII, KV-KV являются МДВ с параллельными осями голоэдрий и целочисленным масштабированием. Однако для этих сочетаний имеются и решения с осями голоэдрий, расположенными под углами друг к другу, которые приведены на рисунках.

Решетки тетрагональной сингонии

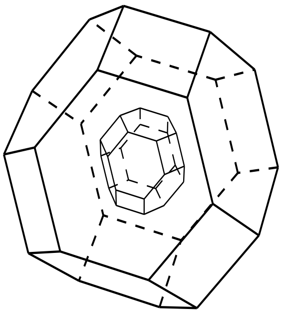
Решетки тетрагональной сингонии характеризуются двумя параметрами, в отличие от решеток кубической сингонии, которые можно задавать одним параметром. Таким образом, уравнений в задаче линейного программирования для тетрагональных решеток Браве будет меньше, что приводит к росту возможных решений. В качестве примера рассмотрим взаимные ориентации для двух сортов QI и QII:

(QI): $$g = k = l = n < 0, \quad h = m < 0$$

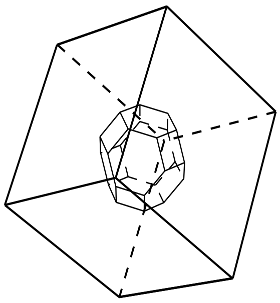
(QII): $$g = k = l = n < 0, \quad h = 0, \quad m < 0$$

Объемноцентрированная (KI)

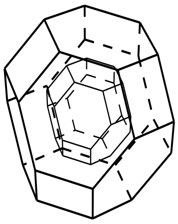
$g = h = k = l = m = n < 0$:



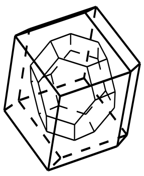
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & 1 \\ 1 & -2 & -2 \\ -2 & 1 & -2 \end{pmatrix}$$



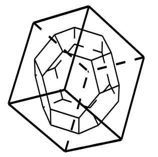
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & 0 \\ 0 & -2 & -2 \\ -2 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$



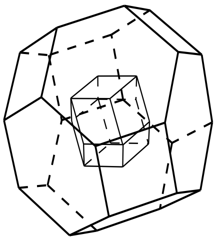
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} 0 & 1 & -1 \\ -1 & -2 & -1 \\ 2 & 1 & 1 \end{pmatrix}$$



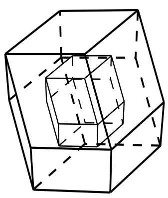
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & 0 \\ 0 & -1 & -1 \\ -1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

Гранецентрированная (KIII)

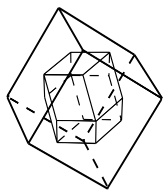
$g = k = l = n < 0, \quad h = m = 0$:



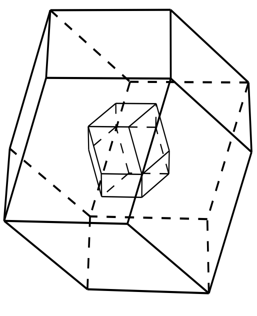
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} 3 & 2 & 1 \\ -1 & 2 & 1 \\ -1 & -2 & 1 \end{pmatrix}$$



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -2 \\ 0 & 0 & 2 \\ 0 & 2 & 0 \end{pmatrix}$$



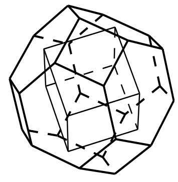
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 1 \\ 1 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$



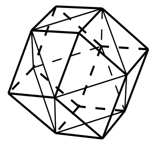
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -3 & -3 & -3 \\ 0 & 0 & 3 \\ 2 & -1 & -2 \end{pmatrix}$$

Простая кубическая (KV)

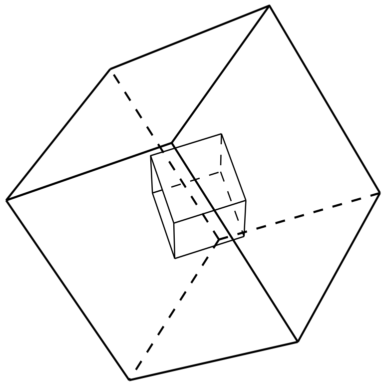
$g = h = k = 0, \quad l = m = n < 0$:



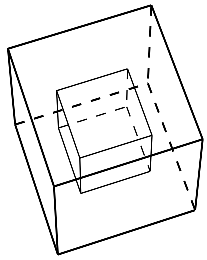
$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -1 & -1 & -1 \\ -1 & 1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} 1 & 1 & 0 \\ 0 & -1 & 1 \\ -1 & 1 & 0 \end{pmatrix}$$



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & -1 \\ -2 & 1 & 2 \\ -1 & 2 & -2 \end{pmatrix}$$



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & 0 & 0 \\ 0 & -2 & 0 \\ 0 & 0 & -2 \end{pmatrix}$$

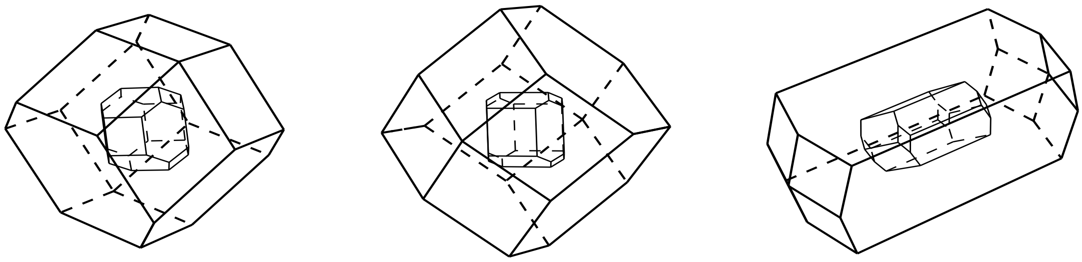
Для приведенных ограничений на n_{ij}, было получено 23 различных решения. Различными считались только те варианты, которые давали такую взаимную ориентацию многогранников Дирихле-Вороного, что ее было невозможно путем поворотов совместить ни с одной из уже ранее найденных пар. На рисунке ниже изображены несколько найденных решений.

Заключение

Условие трансляционной совместимости подрешеток, записанное в форме (1), позволяет исследовать совместимость 14 типов решеток Браве с учетом схемы подчинения сингоний. Переход к системе (5) с практической точки зрения удобен как сведение уравнения (1) к задаче линейного программирования, удобной для реализации на компьютере. Более глубокий смысл этого перехода заключается в том, что параметры Зеллинга позволяют учитывать более тонкую классификацию решеток на сорта Делоне, которых оказывается 24. Фактически типы Браве являются просто объединениями сортов. Именно по сортам идет классификация МДВ [2], что опять же важно при практическом их построении. Найденные в настоящей работе частные решения (5) включают в себя трансляционно-совместимые МДВ как с параллельными осями голоэдрий, так и с осями, расположенными под некоторыми углами.

Литература

1. Делоне, Б. Н. О. Браве. Избранные труды / Б. Н. Делоне, Р. В. Галиулин, М. И. Шторгин. – Л., 1974. – С. 309.
2. Галиулин, Р. В. Кристаллография / Р. В. Галиулин. – 1984. – Т. 29. – № 4. – С. 638.
3. Поплавной, А. С. Кристаллография / А. С. Поплавной, А. В. Силинин. – 2005. – Т. 50. – № 5. – С. 791.
4. Поплавной, А. С. Материаловедение / А. С. Поплавной. – 2005. – № 9. – С. 2.
5. Поплавной, А. С. Известия вузов. Физика / А. С. Поплавной. – 2008. – № 7. – С. 31.



$$n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & 0 \\ -2 & 2 & -2 \\ 0 & -2 & -2 \end{pmatrix} \qquad n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -2 & 0 \\ 1 & -1 & -2 \\ -2 & 1 & -1 \end{pmatrix} \qquad n_{ij} = \begin{pmatrix} -2 & -1 & -2 \\ -1 & 1 & 2 \\ 1 & -1 & 1 \end{pmatrix}$$

Трансляционно-совместимые МДВ для QI-QII

Рецензент – В. И. Крашенин, ГОУ ВПО «Кемеровский государственный университет».