Доклады Академии Наук СССР
1951. Том LXXVIII, № 1

КРИСТАЛЛОГРАФИЯ

Член-корреспондент АН СССР Н. В. БЕЛОВ

ТЕОРЕМА ПУСТОТЫ (ПРИМИТИВНОСТИ) ОСНОВНОГО ПАРАЛЛЕЛЕПИПЕДА КРИСТАЛЛИЧЕСКОЙ РЕШЕТКИ

Основным параллелепипедом кристаллической решетки (параллелепипедальной системы у математиков) считается параллелепипед, построенный на трех кратчайших некомпланарных трансляциях данной решетки (трех последовательных минимумах параллелепипедальной системы). Б. Н. Делоне называет этот параллелепипед приведенным, поскольку он является стандартным, к которому прямым алгорифмом можно притти от любого иного (примитивного) параллелепипеда изучаемой решетки ([1]).

Если для некоторого кристалла построить его решетку и, сохраняя ее параллельность самой себе, совместить ее начало с какой-либо привлекшей наше внимание точкой кристалла, то все прочие гомологические точки (узлы) кристалла должны оказаться только в вершинах последовательных параллелепипедов, и ни одной гомологической точки (узла) не может оказаться внутри параллелепипеда, либо на его грани, либо на ребре — все параллелепипеды пустые.

Весьма длинное — на многих страницах — первоначальное зееберовское доказательство этой теоремы было существенно сокращено Дирихле, применившим впервые ([2]) тот метод, который впоследствии стал более известен как метод федоровских параллелоедров у кристаллографов и метод областей Вороного у математиков. Здесь предлагается более элементарное доказательство почти при отсутствии вычислений, обязательных в методе Дирихле.

Невозможность добавочного (неохваченного вершинами решетки) узла в ребрах или в гранях параллелепипеда, т. е. в плоскости некоторой сетки из трансляций, доказывается применением элементарных теорем о периметрах выпуклой объемлющей и объемлемой ломаной, а также теоремы о меньшей величине полудиагонали параллелограмма по сравнению с одной из сторон.

Если координаты дополнительного (неохваченного вершинами решетки) узла выражаются в долях трех ребер основного параллелепипеда тремя рациональными несократимыми дробями $\frac{q}{m}, \frac{r}{n}, \frac{s}{p}$, то p-кратное повторение трансляции из начала в добавочный узел приведет нас к еще одному добавочному узлу, располагающемуся в грани некоторого параллелепипеда решетки или в его ребре ($m = n$), т. е. к плоской сетке с добавочным узлом внутри петли, что, как было показано, невозможно.

Наиболее труден случай, когда рациональные координаты $\frac{q}{m}, \frac{r}{m}, \frac{s}{m}$ будут тремя несократимыми дробями с одинаковыми знаменалями. m-кратное повторение трансляции от начала до этого добавочного узла приведет нас в одну из вершин некоторой ячейки и не создаст противоречия. Пусть m — нечетное число, $m \geqslant 3$ и пусть c — наибольшая (не меньшая) из трех кратчайших трансляций — сторон основного параллелепипеда a, b, c. Взявши трансляцию из начала в дополнительный узел $\frac{q}{m}$, $\frac{r}{m}$, $\frac{s}{m}$ и повторивши ее целое число x раз, мы выведем дополнительный узел в некоторой ($y+1$-й) ячейке, координаты которого будут $\frac{q'}{m}$, $\frac{r'}{m}$, $\frac{1}{m}$. В самом деле, соответствующее условие $\frac{s}{m}x = y + \frac{1}{m}$ (y — целое) приводит к неопределенному уравнению $sx - my = 1$. При s и m взаимно простых (несократимые дроби) оно всегда имеет целые и положительные решения. Таким образом, в некоторой ячейке, а следовательно, по закону трансляций, и в начальной ячейке существует узел с координатами $\frac{q'}{m}$, $\frac{r'}{m}$, $\frac{1}{m}$. Для дальнейшего важно отметить, что еще один дополнительный узел будет на уровне $\frac{2}{m}$, еще один на уровне $\frac{3}{m}$ и т. д. К этим новым узлам можно притти двукратным, трехкратным и т. д. повторением трансляции из начала в узел $\frac{q'}{m}$, $\frac{r'}{m}$, $\frac{1}{m}$, либо решением аналогичных неопределенных уравнений $sx - my = 2{,}3$ и т. д. (которые всегда имеют целые и положительные решения).

Возвращаемся к добавочному узлу $\frac{q'}{m}$, $\frac{r'}{m}$, $\frac{1}{m}$. При нечетном m этот дополнительный узел обязательно находится внутри одного из четырех параллелепипедов, на которые (см. рис. 1) разбивается основной параллелепипед двумя плоскостями через его центр, причем одна параллельна грани ac, а другая bc. Но более того, дополнительный узел должен оказаться на крыше — верхней грани еще меньшего параллелепипеда, имеющего одной вершиной один из узлов в основании основного параллелепипеда. Ребрами этого малого параллелепипеда будут $\frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)$, $\frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)$, $\frac{c}{m}$ (рис. 1).

Как очевидно из дальнейшего, наиболее неблагоприятное положение дополнительного узла будет в вершине малого параллелепипеда, противоположной узлу в основании. Координаты добавочного узла относительно указанного основного узла будут равны ребрам малого параллелепипеда, т. е. $\frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)$, $\frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right)$, $\frac{c}{m}$. Диагональ параллелепипеда меньше суммы трех его ребер: $d < \frac{a}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right) + \frac{b}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right) + \frac{c}{m}$.

Заменяя в этом неравенстве a и b на большие (не меньшие) величины c, имеем: $d < \frac{c}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right) + \frac{c}{2}\left(1-\frac{1}{m}\right) + \frac{c}{m}$ или $d < c$. Расстояние между основным узлом и дополнительным, т. е. новая добавочная трансляция, оказалась меньшей одной из тех трех трансляций, которые ранее были выбраны нами как кратчайшие, и тем самым теорема доказана.

При $m = 2$ дополнительный (неохваченный) узел попадает в центр основного параллелепипеда, и приведенное доказательство отпадает. Расстояние этого дополнительного узла до начала, равное полудиагонали, определяется из $d^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 2bc\cos\alpha + 2ca\cos\beta + 2ab\cos\gamma$.

Если параллелепипед тупоугольный, то все три члена с косинусами отрицательны и, следовательно, $d^2 < a^2 + b^2 + c^2$; $d^2 < 3c^2$, а полудиагональ $\frac{1}{2}d < \frac{1}{2}c\sqrt{3}$; $\frac{1}{2}d < 0{,}867c$. Это же неравенство сохраняется и для прямоугольного параллелепипеда, когда три последних слагаемых — нули.

В остроугольном* параллелепипеде его большая полудиагональ может стать длиннее, чем любое ребро. Так, при $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 60°$ (нетрудно показать, что 60° есть наименьший возможный плоский угол в основном параллелепипеде решетки) $d^2 = 3c^2 + 3c^2 = 6c^2$; $d = c\sqrt{6}$; $\frac{1}{2}d = \frac{1}{2}c\sqrt{6} = 1{,}22\,c$.

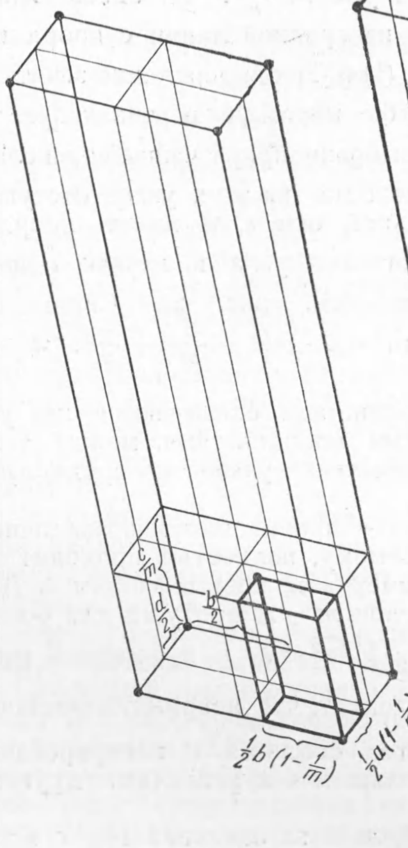

Рис. 1

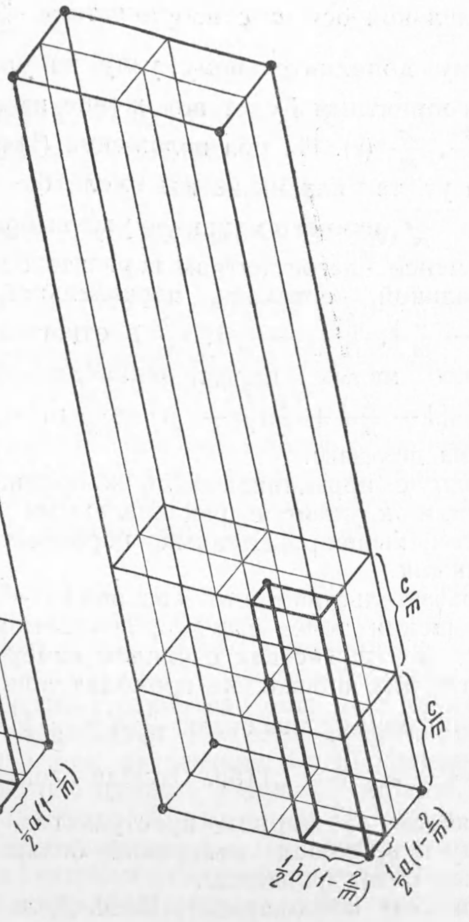

Рис. 2

Однако одна из четырех полудиагоналей любого остроугольного параллелепипеда всегда оказывается меньшей одного из ребер. В самом деле, если векторное выражение большей диагонали $\mathfrak{d} = \mathfrak{a} + \mathfrak{b} + \mathfrak{c}$, то меньшие диагонали, соответственно, будут: $\mathfrak{d}' = -\mathfrak{a} + \mathfrak{b} + \mathfrak{c}$; $\mathfrak{d}'' = \mathfrak{a} - \mathfrak{b} + \mathfrak{c}$; $\mathfrak{d}''' = \mathfrak{a} + \mathfrak{b} - \mathfrak{c}$. Числовое значение этих векторов определяется из $d'^2 = a^2 + b^2 + c^2 + 2bc\cos\alpha - 2ca\cos\beta - 2ab\cos\gamma$ и двух аналогичных выражений, в которых положительными будут в одном второй член с косинусом и в другом — третий при одинаковости соответствующих слагаемых по абсолютной величине. Один из трех последних членов

* Как известно, любой параллелепипед, не имеющий прямых плоских углов, обязательно будет либо тупоугольным, т. е. у одного из углов все плоские углы тупые, либо остроугольным, у которого плоские углы одной из вершин все острые.

обязательно должен оказаться наименьшим или не большим, чем другие два, а тогда для соответствующей диагонали $d^2 < a^2 + b^2 + c^2$; $d < 3c^2$; $\frac{1}{2} d < \frac{1}{2} c \sqrt{3}$; $d < 0{,}867\, c$, и теорема доказана.

Доказательство сохраняет силу и при одном или двух прямых плоских углах.

Если m — число четное, большее 2, то наиболее неблагоприятное положение добавочного угла на уровне $\frac{1}{m}$ будет на средней линии, параллельной оси c с координатами $\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{c}{m}$ (1). Обращаемся ко второму дополнительному узлу на уровне $\frac{2}{m}$. И здесь наиболее неблагоприятным будет положение на средней линии с координатами $\frac{a}{2}, \frac{b}{2}, \frac{2c}{m}$ (2). Но оба положения (1) и (2) одновременно заняты быть не могут, так как иначе мы имели бы короткую вертикальную трансляцию $\frac{c}{m}$, намного меньшую уже выбранной кратчайшей трансляции c. В наименее благоприятном варианте один из этих узлов отступает от центральной вертикали, параллельной оси c, и имеет координаты $\frac{a}{2}\left(1 - \frac{2}{m}\right), \frac{b}{2}\left(1 - \frac{2}{m}\right), \frac{2c}{m}$ в отношении узла в начале одного из четырех малых параллелепипедов (см. рис. 2). Снова имеем $d < \frac{a}{2}\left(1 - \frac{2}{m}\right) + \frac{b}{2}\left(1 - \frac{2}{m}\right) + \frac{2c}{m}$; $d < 2\,\frac{c}{2}\left(1 - \frac{2}{m}\right) + \frac{2c}{m}$; $d < c$, и теорема доказана.

Узлы с иррациональными координатами оказываются как угодно близкими к узлам с рациональными координатами, между тем как во всех вышеприведенных неравенствах разности предполагались конечными.

Доказательство пустоты основного — приведенного параллелепипеда, в отношении точек с $m \geqslant 3$, повидимому, полностью проходит и для ячеек в пространствах с числом измерений, превышающим 3. Доказательство это, однако, не проходит при $m = 2$, ибо уже для 4-мерного куба половина диагонали $\frac{1}{2} d = \frac{1}{2} \sqrt{4a^2} = a$, а в 5-мерной решетке $\frac{1}{2} d = \frac{1}{2} a \sqrt{5} = 1{,}118a$. Отсюда следует, что непримитивность основных ячеек в 4-мерном пространстве сводится к центрированию по объему и при числе измерений большем 4 к различным другим возможным центрированиям.

Приношу благодарность Б. Н. Делоне за ознакомление с историей вопроса о приведении.

Поступило
5 III 1951

ЦИТИРОВАННАЯ ЛИТЕРАТУРА

[1] Б. Н. Делоне, Усп. матем. наук, 3, 44 (1938). [2] Б. Н. Делоне, там же, 4, 120 (1938).