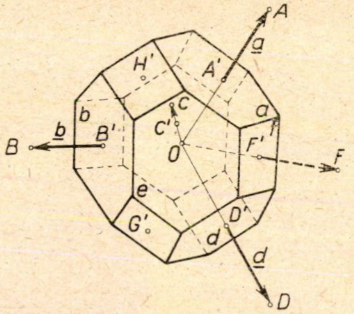
DELAUNAY NÉHÁNY TÉTELÉNEK BIZONYÍTÁSA

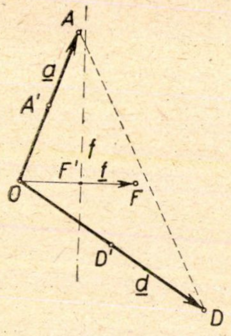
Írta: ZSOLDOS LEHEL

DELAUNAY (1933) igen egyszerű és szemléletes redukciós eljárást vezetett be, amelynek segítségével egy pontrács bármely primitív elemi cellájának ismeretében könnyűszerrel meghatározhatjuk a pontrácsra jellemző Bravais-cella adatait. A redukció elméletében azonban néhány állítását nem bizonyította. A jelen közlemény célja ezek bizonyítása. DELAUNAY módszere néhány év óta a finomszerkezet vizsgálatban egyre nagyobb gyakorlati jelentőségre tesz szert [lásd ITÔ (1949)], ezért aktuális a felmerült problémák tisztázása.

DELAUNAY cikkének 5,1 §-ában a következőképen vezette be a redukált vektronégyes (reduzierte Vierseit) fogalmát. Tekintsük a legáltalánosabb — az ő jelölései szerint I. típusú — pontrács egy O pontjának Voronoi-tartományát.[1] (1. ábra) Ezt összesen 14 síkidom határolja, melyek közül 8 hatszög



1. ábra



2. ábra

és 6 négyszög. Válasszunk ki négy egymással nem érintkező hatszög határoló lapot. Ez a centroszimmetrikus pároktól eltekintve egyértelműen megtehető. E négy síkfelület mentén négy szomszédos rácspont Voronoi-tartománya érintkezik O Voronoi-tartományával. Jelöljük ezeket a rácspontokat A, B, C, D-vel

[1] A Voronoi-tartományok definíciója és tulajdonságai részletesen megtalálhatók DELAUNAY idézett cikkében. A Voronoi-tartományok alakja szerint DELAUNAY a pontrácsokat öt csoportra osztotta.

s az ide mutató vektorokat **a**, **b**, **c**, **d**-vel. A négy vektort együttesen redukált vektornégyesnek nevezzük.

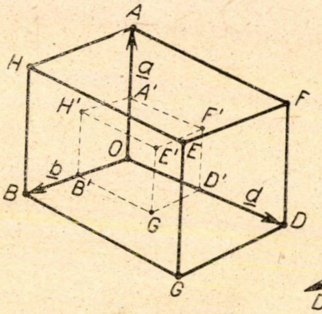
I. *Bebizonyítjuk, hogy e négy vektor közül bármely három primitív elemi cellát feszít ki és valóban teljesül az* $\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c}+\mathbf{d}=0$ *követelés.* Első lépésként megmutatjuk, hogy az így kiválasztott cellák felülete nem tartalmazhat rácspontot. Vizsgáljuk meg pl. az OAD síkot (2. ábra). Feltételeink szerint az a és d lapok nem érintkeznek,[2] van tehát közöttük egy lap, amit jelöljünk f-fel. A Voronoi-tartományok tulajdonságaiból következik, hogy az a, f, d lapok és centroszimmetrikus párjaik zárt felületzónát alkotnak, és ezért f normálvektora, amely az F rácspontba mutat, az OAD síkban fekszik. De ez az F pont nem feküdhet az OAD_{Δ}-ben, vagy az AD egyenesen. Ebben az esetben ui. A', D', ill. F'-vel jelölve az $\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OD}$, ill. $\overrightarrow{OF}$ vektoroknak és O Voronoi tartományának döféspontját (melyek egyben az OA, OD, OF egyenesek felezőpontjai is) — ha ezt a síkot egy az F' ponton áthaladó $\overrightarrow{OF}$-re merőleges egyenessel kettévágjuk, egyik félsík sem tartalmazhatja egyidejűleg az O, A', D' pontokat és ezeknek valamely véges környezetét. Ebből következik, hogy az A' és D' pontok nem lehetnek egyidejűleg közelebb O-hoz mint F-hez. Viszont feltételeink értelmében az a és d lapok léteznek, s így a Voronoi-tartomány definíciója folytán A' és D' — az A és D pontokat kivéve — közelebb van O-hoz, mint bármely más rácsponthoz, tehát mint pl. F-hez. Ellentmondásra jutottunk, ezért F valóban csak az AD egyenesen kívül feküdhet. A rácskritérium miatt azonban itt is csak úgy helyezkedhet el, hogy $OAFD$ parallelogrammát alkosson (ellenkező esetben az OAD_{Δ}-ben is kell lennie rácspontnak). Az **a** és **d** vektorok által kifeszített parallelogramma tehát primitív. Ugyanez érvényes a többi vektorpárra is.

Megmutatjuk most, hogy az elemi cellák belseje sem tartalmazhat rácspontot. Rajzoljuk fel pl. az **a**, **b**, **d** elemi cellát (3. ábra), s vágjuk ezt el az F, G, H pontokon átmenő síkkal. A cellának az a nagyobbik fele, melyhez O is tartozik, nem tartalmazhat belsejében rácspontot. Ha ui. lenne egy ilyen I pont, akkor az I ponton áthaladó $\overrightarrow{OI}$-re merőleges sík újabb részt vágna le a cella említett feléből, s ezért ez nem tartalmazhatná egyidejűleg az O, A, B, D, G, F, H csúcspontokat. Ha $A', B', \ldots$ stb.-vel jelöljük az OA, OB, stb... távolságok felezőpontjait, akkor ez azt jelenti, hogy az OI egyenes felezőpontjában emelt $\overrightarrow{OI}$-re merőleges sík a teret két olyan részre osztja, melyek közül egyik sem tartalmazhatja egyidejűleg az $O, A', B', D', F', G', H'$ pontokat, s ezért a fenti pontok nem lehetnek valamennyien közelebb O-hoz, mint I-hez. Ugyanolyan ellentmondásra jutottunk mint az előbb, hiszen feltételeztük, hogy az

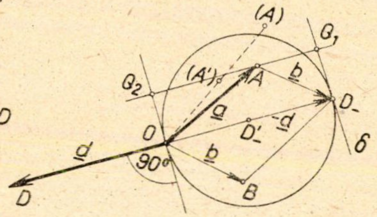
[2] Itt $a, b, \ldots$-al jelöltük a Voronoi-tartománynak azokat a határlapjait, amelyeknek normálvektorai **a**, **b**, ...

a, b, d, f, g, h lapok léteznek, s ezért A', B', D', F', G', H' együttesen az O ponthoz vannak legközelebb.

Ezzel megmutattuk, hogy az $\overrightarrow{OA}, \overrightarrow{OB}, \overrightarrow{OD}$ vektorok által kifeszített elemi cella primitív. Ugyanez bebizonyítható a másik három vektorhármasról is. A fentiekből most már nyilvánvaló, hogy az a, b, d lapok közt fekvő e lap normálvektora a fenti elemi cella testátlója s az E pontba mutat, s ezért $\overrightarrow{OA}+\overrightarrow{OB}+\overrightarrow{OD}=\overrightarrow{OE}$. Viszont $\overrightarrow{OE}=-\overrightarrow{OC}$ s így $\overrightarrow{OA}+\overrightarrow{OB}+\overrightarrow{OC}+$ $+\overrightarrow{OD}=0$.



3. ábra



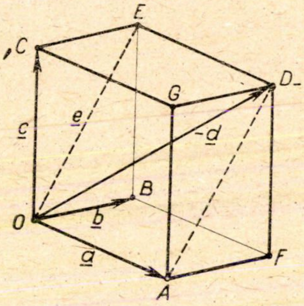
4. ábra

II. DELAUNAY redukált paramétereknek nevezte el a redukált vektornégyes vektorainak páronkénti skaláris szorzatait (**ab**, **bc**, **bd**, **ad**, **ac**, **cd**) és bebizonyította, hogy a redukált paraméterek között pozitív szám nem fordulhat elő. *Megmutatjuk most, hogy az előbb definiált redukált vektornégyest kivéve, nem található még egy olyan primitív vektornégyes, melynek páronkénti skaláris szorzatai között pozitív szám nem szerepel.* Tehát a nem pozitív paraméterek alapján a redukált vektornégyes egyértelműen felismerhető. Állításunkat több lépésben bizonyítjuk be.

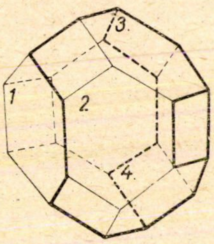
1. A vektornégyes kiválasztásánál csak olyan vektorok jönnek szóba, amelyek szomszédos rácspontokba mutatnak. (Szomszédosnak nevezünk két rácspontot, ha Voronoi-tartományaiknak van közös pontjuk. I. típusú pontrács esetén egy közös határoló lapjuk van).

Vizsgáljuk meg először a kétdimenziós pontrácsot. Legyen pl. **d** olyan vektor, amely egy nem szomszédos rácspontba mutat. Jelöljük D_--szal a $-$**d** vektor végpontjában lévő rácspontot (4. ábra). Válasszuk ki azt az A rácspontot, amely az $\overline{OD_-}$ egyenesre, mint átmérőre emelt körön belül van s amelyre az **a** és $-$**d** vektorok hajlásszöge a legkisebb. Egy ilyen pont bizonyára van, mert ellenkező esetben az OD_- távolság D'_- felezőpontja közelebb volna O-hoz és D_--hoz, mint bármely rácsponthoz; ez pedig csak akkor lehet, ha O és D_- szomszédosak.

Az $OAD_{-}\Delta$ egy primitív elemi cella egyik felét képezi, azonban a cella élvektorainak skalár szorzata; $\mathbf{ab} > 0$. A primitív cella területe: $\mathbf{a} \times \mathbf{b} = \mathbf{a} \times (-\mathbf{d})$. Tudjuk, hogy a primitív cella területe független az élek választásától, ezért adott **d** esetén, csak olyan vektor képezheti egy primitív cella élét, amelynek végpontja az előbbi A ponton átmenő és $-\mathbf{d}$-vel párhuzamos egyenesen fekszik (ebben az esetben lesz a vektor-szorzat állandó). Mivel ezen az egyenesen az identitás távolság $\overline{OD_{-}} = \overline{Q_1 Q_2}$, több rácspont a Q_1 és Q_2 pontok közé nem eshet, s így sohasem érhető el, hogy a három vektor (**a**, **b**, **d**) egymással tompa szöget zárjon be (skaláris szorzatuk negatív legyen).



5. *ábra*



6. *ábra*

Térjünk most át a háromdimenziós pontrácsra. Tegyük fel ismét, hogy egy primitív vektornégyes **d** vektora nem szomszédos rácspontba mutat, de egyébként a vektorok skaláris szorzatai nem pozitívek. Tekintsük az $OAD_{-}E$ pontok síkját (5. ábra). Mivel

$$\mathbf{cd} \leqq 0, \quad \mathbf{bd} \leqq 0,$$

ezért

$$\mathbf{ed} = \mathbf{cd} + \mathbf{bd} \leqq 0,$$

továbbá

$$\mathbf{ae} \leqq 0.$$

Így az **e** és **a** vektorokkal képezett parallelogramma az OAD_{-} síkbeli pontrácsnak egy olyan primitív elemi cellája, amelyre

$$\mathbf{a} + \mathbf{e} + \mathbf{d} = 0,$$

$$\mathbf{ae} \leqq 0, \quad \mathbf{ad} \leqq 0, \quad \mathbf{ed} \leqq 0.$$

A fentiek értelmében ez azonban csak úgy lehetséges, ha D_{-} a síkrácsban O-val szomszédos, vagyis az OD_{-} egyenes egyetlen pontja sem tartozhat E vagy A Voronoi-tartományához. Ugyanez mondható el a B, C, G, F pontokról is, amiből következik, hogy a D_{-} (és ezzel együtt a D pont is) a térrácsban is szomszédos O-val.

Ezek után megállapíthatjuk, hogy I. típusú rács esetén a vektornégyes kiválasztásánál valóban csak a szomszédos pontokba mutató vektorok, tehát a határlapok normálisai jöhetnek szóba.

2. Nem szerepelhetnek a vektornégyesben olyan vektorok, melyek egymásnak (—1)-szeresei. Ekkor ui. az $\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{c}+\mathbf{d}=0$ feltétel miatt a négy vektor konplanáris.

3. Nem szerepelhetnek a Voronoi-tartomány egymással érintkező lapjainak normálisai, mivel két szomszédos lapnormális mindig hegyesszöget zár be egymással.

Ha e három feltételt szem előtt tartjuk a legáltalánosabb Voronoi-tartomány alapján csak kétféleképpen tudunk négy vektort kiválasztani:

a) a négy vektor négy egymással nem érintkező hatszöglap normálisa (redukált vektornégyes).

b) a négy vektor közül legalább egy valamelyik négyszöglap normálisa (1). Az ezt környező négy hatszöglap és az átellenes négyszöglap tiltott (6. ábra). A tiltott lapokat vastag vonalakkal határoltuk. Marad négy hatszög és négy négyszöglap. Az egyik vektornak most is feltétlenül valamelyik hatszöglapon kell áthaladnia (2.), hiszen csak két pár négyszöglap van. Ezzel négy lap ismét tiltottá válik, s a fennmaradt két vektort egyértelműen a négyszöglapok normálisai közül kell kiválasztani (3. és 4.). Ekkor azonban ha pl. a hatszöglapokon áthaladó vektorok közül $\mathbf{c}$ szerepel a vektornégyesben, a másik három vektor szükségképpen $\mathbf{f}, \mathbf{g}, \mathbf{h}$. De

$$\mathbf{f}+\mathbf{g}+\mathbf{h}=(\mathbf{a}+\mathbf{d})+(\mathbf{b}+\mathbf{d})+(\mathbf{a}+\mathbf{b})=2(\mathbf{a}+\mathbf{b}+\mathbf{d})=-2\mathbf{c}.$$

Így

$$\mathbf{f}+\mathbf{g}+\mathbf{h}+\mathbf{c}=-\mathbf{c}\neq 0,$$

s ezenkívül a vektornégyes nem is primitív. Tehát csak egyféleképpen tudunk primitív és nem pozitív paraméterekkel rendelkező vektornégyest kiválasztani, s ez éppen a redukált vektornégyes.

III. *Végül megmutatjuk, hogy a* DELAUNAY *által javasolt redukciós eljárás során a primitív vektornégyes ismét primitívbe megy át.* A redukciós eljárás abból áll, hogy az

$$\mathbf{a}, \mathbf{b}, \mathbf{c}, \mathbf{d}$$

vektorok helyett rendre a

$$\mathbf{c}, -\mathbf{b}, \mathbf{a}+\mathbf{b}, \mathbf{d}+\mathbf{b}$$

vektorokat tekintjük. Az 1. ábrának megfelelő irányításban az elemi cellák térfogata

$$V=\mathbf{a}\,\mathbf{b}\,\mathbf{d}=\mathbf{a}\,\mathbf{d}\,\mathbf{c}=\mathbf{a}\,\mathbf{c}\,\mathbf{b}=\mathbf{b}\,\mathbf{c}\,\mathbf{d}.$$

A redukció után pedig

$$V' = \mathbf{c}[(-\mathbf{b}) \times (\mathbf{d} + \mathbf{b})] = -\mathbf{cbd} = V,$$
$$V' = \mathbf{c}[(\mathbf{d} + \mathbf{b}) \times (\mathbf{a} + \mathbf{b})] = \mathbf{c}[\mathbf{d} \times \mathbf{a} + \mathbf{d} \times \mathbf{b} + \mathbf{b} \times \mathbf{a}] =$$
$$= -\mathbf{adc} + \mathbf{bcd} + \mathbf{acb} = \mathbf{acb} = V \text{ stb.}$$

Az elemi cellák térfogata a redukció során változatlan, tehát az új vektornégyes primitív.

Az eddigi megfontolásaink I. típusú pontrácsra vonatkoztak. Eredményeink azonban minden pontrácsra egyaránt érvényesek. Ugyanis mint DELAUNAY megmutatta, bármely pontrács előállítható I. típusú pontrácsból annak egy folytonos, egyirányú, homogén deformációjával, miközben a Voronoi-tartományok egyes határlapjai egyenesekké vagy pontokká zsugorodnak össze. Továbbá a nem I. típusú pontrácsban redukáltnak azt a vektornégyest nevezzük, amelyhez a megfelelő I. típusú rács redukált vektornégyese tart, ha a szükséges deformációt végrehajtjuk. Folytonos deformáció során primitív cella primitívbe megy át, s így I. tételünk általános érvényessége nyilvánvaló. A II. tétel érvényességét pedig az biztosítja, hogy a szomszédos pontok a deformáció után is szomszédosak maradnak.

Befejezésül köszönetet mondok SÁNDOR ENDRÉNEK, aki felhívta figyelmemet a fenti problémákra.

IRODALOM

B. DELAUNAY: Neue Darstellung der geometrischen Kristallographie, *Z. Kristallographie*, **84** (1933) 109—149.

T. ITÔ: A general X-Ray Powder Photography, *Nature*, **161** (1949) 775.

(Beérkezett: 1958. IX. 3.)

Az Eötvös Loránd Tudományegyetem
I. sz. Kísérleti Fizikai Intézete