сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

Р17-88-482 е

Й.Н.Коцев, Д.А.Александрова

ЦВЕТНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ: КЛАССИФИКАЦИЯ И ПРИМЕНЕНИЕ В ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛАХ

1988

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние два десятилетия в физике твердого тела, в кристаллографии и в математике все более активно изучаются и применяются обобщенные кристаллографические группы, известные как группы цветной симметрии (см. напр. монографии [1-3], обзоры [4,5] и цитируемую в них литературу). Наиболее общая теория и классификация этих групп, основанная на теории групповых расширений и индуцированных представлений пространственных групп, впервые была предложена в [6]. В настоящей работе рассматривается современное состояние теории, классификации, табулирования и приложения в физике лишь одного типа групп цветной симметрии – P-типа, где преобразование "цветов" осуществляется подстановками из транзитивной подгруппы P симметрической группы S_n. Вслед за Ван дер Варденом [7] будем называть здесь "цветными группами" лишь группы этого типа, изоморфные кристаллографическим пространственным группам. Особый интерес к этим группам вызван их эффективным применением в теории фазовых переходов Ландау [8-11] и в симметрийном анализе тензорных свойств кристаллов [12]. В следующем пункте приводятся основные положения теории цветных пространственных групп и их "хромоморфная" классификация [6,10] и излагается метод их вывода. В п.3 рассматривается приложение выведенных цветных групп в анализе фазовых переходов в кристаллах (в рамках теории Ландау). Дается сравнение с результатами других авторов [1-3,7,13,18].

2. ЦВЕТНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ

В соответствии с определением [1-7], n-цветные группы $G^{(p)}$, изоморфные кристаллографическим группам G, являются подгруппами прямого произведения групп $P\times G$, где P – транзитивная подгруппа симметрической группы S_n :

$$G^{(p)}=\left\{ (p;g) \;\middle|\; p=\pi_G^{H'}(g)\in P,\quad g\in G,\quad \pi_G^{H'}:G\longrightarrow P\le S_n \right\}\subset P\times G\,.\qquad(1)$$

Здесь гомоморфизм $\pi_G^{H'}: g\longrightarrow p$ определяется [6,7] посредством подстановок (под действием $g\in G$ слева) левых смежных классов g_iH' в разложении группы G по ее подгруппе $H'\subset G$ индекса $[G:H']=n$. Группа P

есть образ построенного таким способом перестановочного представления $D_G^{H'}$ группы G,

$$P = \pi_G^{H'}(G) = \operatorname{Im} D_G^{H'}, \tag{2}$$

а ядро этого представления (ядро гомоморфизма $\pi_G^{H'}$)

$$\operatorname{Ker} D_G^{H'} = \operatorname{Ker} \pi_G^{H'} = H \subset G \tag{3}$$

есть максимальная инвариантная подгруппа H группы G, содержащейся в H' и во всех сопряженных с ней подгруппах, т.е.

$$H = \bigcap_{g \in G} g H' g^{-1} \subset G. \tag{4}$$

Особо важную роль в теории цветных групп играют абстрактные группы A и $A' \subset A$, изоморфные фактор-группам G/H и H'/H ,

$$\begin{aligned} &A \simeq G/H \simeq P \le S_n \\ &A' \simeq H'/H \end{aligned} \tag{5}$$

вместе с гомоморфизмом φ , $\operatorname{Ker} \varphi = H$, связывающим цепочки подгрупп

$$\begin{array}{ccccc} G & \supset & H' & \supset & H = \bigcap_{g \in G} g H' g^{-1} \\ \varphi\downarrow & & \varphi\downarrow & & \varphi\downarrow \\ A & \supset & A' & \supset & C_1 = \bigcap_{a \in A} a A' a^{-1} . \end{array} \tag{6}$$

Подстановками смежных классов $a_i A'$ из разложения абстрактной группы A по подгруппе A' реализуется точное $(\operatorname{Ker} D_A^{A'} = C_1)$ перестановочное представление $D_A^{A'}$ группы A. Учитывая также изоморфизм (5), удобно обозначить транзитивную подгруппу P в (1) более информативным символом $(A,A')_n \le S_n$. Таким образом, введенный в [6] "полный символ" цветных групп $G^{(p)}$,

$$G^{(p)} \equiv G \;/\; H'/H \;(A,A')_n \tag{7}$$

несет в себе содержащуюся в (6) информацию и однозначно характеризует соответствующие цветные группы: символом (7) обозначена

n-цветная группа, изоморфная кристаллографической группе G; ее максимальная "одноцветная" (т.е. сохраняющая все цвета) подгруппа $H^{(1)}$ изоморфна инвариантной подгруппе $H = \operatorname{Ker} D_G^{H'}$, а максимальная подгруппа, сохраняющая хотя бы один цвет, изоморфна подгруппе H' индекса n в G.

Транзитивные группы подстановок цветов $(A,A')_n = P$ стали основой предложенной в [6,10] классификации цветных групп по классам "хромоморфизма": к одному хромоморфному классу относятся все цветные группы (7) с одинаковой группой преобразования цветов $(A,A')_n$. Все 279 точечных и все пространственные цветные группы с одноцветной трансляционной подгруппой $T^{(1)}$ (их число – 2571) относятся к 45 хромоморфным классам [10,6,2]. Цветные группы данного хромоморфного класса могут быть изоморфны совершенно разным кристаллографическим группам. Соответствующие им существенно различающиеся по структуре кристаллы имеют изоморфные "цветные подпространства", т.е. одинаковый характер ряда физических свойств (фазовых переходов, колебательных спектров и др.). Это связано с тем, что все перестановочные представления $D_G^{H'}$ в этих группах имеют одинаковый образ $\varphi(D_G^{H'}) = D_A^{A'}$, то есть все они порождаются (точным) перестановочным представлением $D_A^{A'}$ абстрактной группы A:

$$\varphi^{-1}(D_A^{A'}) = D_G^{H'} = \sum_j (D_G^{H'}|D_G^j)\, D_G^j . \tag{8}$$

Все неприводимые представления $D_G^j = \varphi^{-1}(D_A^j)$ групп G в (8) порождаются неприводимыми компонентами D_A^j из разложения

$$D_A^{A'} = \sum_j (D_A^{A'}|D_A^j)\cdot D_A^j , \tag{9}$$

где коэффициенты в обоих случаях совпадают,

$$(D_A^{A'}|D_A^j) = (D_G^{H'}|D_G^j) . \tag{10}$$

Существенно отметить, что $\operatorname{Ker} D_G^j = H$ лишь если D_A^j является точным неприводимым представлением абстрактной группы A.

Рассмотренная связь между представлениями групп и их фактор-групп есть один из каналов приложения цветных групп в физике. Второй канал дается теорией индуцированных представлений. В работах [8,9] показано, что транзитивное перестановочное представление $D_G^{H'}$

эквивалентно представлению, индуцированному в G единичным представлением $D^1_{H'}$, ее подгруппы H' :

$$D^{H'}_G = D^1_{H'} \uparrow G \; . \tag{11}$$

Отсюда, в соответствии с теоремой взаимности Фробениуса, кратность вхождения неприводимого представления D^j_G в $D^{H'}_{G}$ дает нам (субдукционную) кратность единичного представления $D^1_{H'}$ подгруппы H' в ограничении $D^j_G \downarrow H'$ неприводимого представления D^j_G на подгруппу $H' \subset G$ (см.[8,9]),

$$(D^j_G \downarrow H' \mid D^1_{H'}) = (D^{H'}_G \mid D^j_G). \tag{12}$$

Следовательно, число независимых инвариантов группы H', составленных из преобразующихся по D^j_G величин, дается кратностью вхождения D^j_G в перестановочное представление $D^{H'}_G$. (Это решает одну из основных проблем группового анализа фазовых переходов в кристаллах (см. следующий раздел)).

Для вывода и табулирования цветных групп использовались разные методы и определения эквивалентности групп (см. напр.[1,2,6,7,11]). С точки зрения физических применений наиболее целесообразно выбрать принятое в[8-10] определение эквивалентности, которым пользовался Ван дер Варден[7] :

Цветные группы $G/H'_1/H$ и $G/H'_2/H$, порожденные данной кристаллографической группой G, считаются эквивалентными, если подгруппы H'_1 и H'_2 сопряжены в G.

Для вывода цветных пространственных групп нами был разработан и применялся метод[11,16], в котором $G^{(p)} = G/H'/H(A,A')_n$ строится как расширение ее одноцветной подгруппы $H^{(1)} \simeq H$ с помощью транзитивной группы подстановок $P = (A,A')_n \leq S_n$. Это можно записать в виде короткой точной последовательности морфизмов

$$C_1 \longrightarrow H^{(1)} \longrightarrow G^{(p)} \longrightarrow P \longrightarrow C_1 \; . \tag{13}$$

Так как любая федоровская (пространственная) группа G является расширением своей трансляционной подгруппы T с помощью точечной группы $\hat{G}$,

$$C_1 \longrightarrow T \longrightarrow G \longrightarrow \hat{G} \longrightarrow C_1 \quad , \tag{14}$$

основой для вывода цветных пространственных групп служат коммутативные диаграммы следующего вида:

$$\begin{tikzcd}
 & C_1 \arrow[d] & C_1 \arrow[d] & C_1 \arrow[d] & \\
C_1 \arrow[r] & T^{(1)}_H \arrow[r] \arrow[d] & T^{(p')}_G \arrow[r] \arrow[d] & P_T \arrow[r] \arrow[d] & C_1 \\
C_1 \arrow[r] & H^{(1)} \arrow[r] \arrow[d] & G^{(p)} \arrow[r] \arrow[d] & P \arrow[r] \arrow[d] & C_1 \\
C_1 \arrow[r] & \hat{H}^{(1)} \arrow[r] \arrow[d] & \hat{G}^{(p)} \arrow[r] \arrow[d] & \hat{P} \arrow[r] \arrow[d] & C_1 \\
 & C_1 & C_1 & C_1 &
\end{tikzcd} \tag{15}$$

Подробнее метод вывода и содержащие богатую информацию обширные таблицы цветных групп отражены в отдельных публикациях. Нами выведены и составлены полные таблицы всех цветных пространственных групп с одноцветными трансляциями[11,17] $G^{(p)} = T^{(1)}\hat{G}^{(p)}$ (их число – 2571) , а также группы с цветными трансляциями $T^{(p')}\hat{G}^{(p)}$ для всех 26 кубических классов хромоморфизма (их число – 2402; все они связаны с точками выделенной симметрии в зоне Бриллюэна). Распределение выведенных цветных пространственных групп по 45 классам хромоморфизма дано в приведенной в следующем разделе таблице.

3. ЦВЕТНЫЕ ГРУППЫ В ТЕОРИИ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ В КРИСТАЛЛАХ

Феноменологическая теория фазовых переходов (ФП) Ландау и применяемые в ней теоретико-групповые методы хорошо известны (см.напр. [13,14]). Развитая в[8-10] цветно-групповая формулировка симметрийного анализа ФП позволяет повысить эффективность метода: результаты отличаются универсальностью, а для конкретных случаев их можно извлечь непосредственно из опубликованных таблиц цветных групп и их перестановочных представлений. Цветно-групповой анализ ФП в идейном плане ближе всего к подходу, впервые разработанному Гуфаном с сотрудниками (см. напр.[13], а также[15,19]).

Как известно, для существования непрерывного (или близкого к нему) ФП с понижением симметрии от G до $H' \subset G$, где компоненты параметра порядка преобразуются по (физически) неприводимому представлении D_G^j, необходимо, чтобы элементы триад (G,H',D_G^j) отвечали определенным условиям (т.наз. групповые критерии). Перечислим эти условия, указывая, каким образом в таблицах цветных групп можно найти искомую информацию.

Условие А. Группы симметрии обеих фаз связаны подгрупповым условием $H'\subset G$, причем сопряженным с H' подгруппам соответствуют эквивалентные состояния, т.е. различные домены одной и той же фазы. Для каждой группы G полный набор представителей $H'\subset G$ всех классов сопряженных подгрупп можно найти на второй позиции символа $G/H'/H(A,A')_n$. Условие эквивалентности цветных групп исключает "лишние" (сопряженные) подгруппы, а полнота списков обеспечивает полноту рассмотрения всех потенциально возможных при ФП изменений симметрии. Число цветов $n = [G:H']$ дает число эквивалентных фаз (доменов).

Условие Б. Ограничение неприводимого представления D^j, по которому преобразуются компоненты параметра порядка, на группу симметрии новой фазы $H'\subset G$, должно содержать единичное представление $D^1_{H'}$, т.е. $(D_G^j \downarrow H' \mid D^1_{H'}) \ge 1$. Этому "субдукционному критерию" удовлетворяют, как следует из (12), лишь D_G^j, содержащиеся в разложении перестановочного представления $D_G^{H'}$ (8), а их полный список дается в таблицах рядом с символом цветной группы.

Условие В. Как было показано в [8,9], из удовлетворяющих условию (Б) представлений D_G^j следует отбросить все, для которых $\mathrm{Ker}\, D_G^j \neq H$, где H находится в III позиции символа $G/H'/H(A,A')_n$. Из (6) видно, что все D_G^j с ядром $\mathrm{Ker}\, D_G^j = H$ порождаются лишь точными неприводимыми представлениями D_A^f группы A, содержащимися в $D_A^{A'}$, т.е.

$$D_G^j = \varphi^{-1}(D_A^f), \quad D_A^f \in D_A^{A'}, \quad \mathrm{Ker}\, D_A^f = C_1. \tag{16}$$

Если перестановочное представление $D_A^{A'}$ не содержит точного неприводимого представления группы A, то во всех цветных группах данного хромоморфного класса $(A,A')_n$ нет ни одной триады (G,H',D_G^j), допускающей ФП по неприводимому представлению. Из таблицы видно, что этим условием сразу же исключается возможность ФП для сотен и тысяч пар G, H'. Более того, H в $G/H'/H(A,A')_n$ есть минимальная подгруппа, удовлетворяющая условию $\mathrm{Ker}\, D_G^j = H$, т.е. для каждого D_G^j отбрасывается бесконечный "хвост" $H_1 \supset \dots$ в цепочках подгрупп $G \supset \dots \supset H \supset H_1 \supset \dots$

Условие Г. (Цепочный критерий Бирмана – Ярика[8,9,14,15]). В цепочках (максимальных) подгрупп $G \supset H_1' \supset H_2' \supset \dots$ из всех подгрупп, для которых субдукционная кратность единичного представления $D^1_{H_i'}$ одинакова,

$$(D_G^j \downarrow H_i' \mid D^1_{H_i'}) = (D_G^j \downarrow H_{i+1}' \mid D^1_{H_{i+1}'}) = \dots \ge 1, \tag{17}$$

с ФП по D_G^j связана лишь максимальная. Проверка этого условия для (бесконечных) пространственных групп значительно легче осуществляется с помощью конечных групп A и $A'\subset A$, ограничиваясь при этом лишь точными неприводимыми представлениями D_A^f. В таблице верхним индексом "c" отмечены те D_A^f, которые в триадах (A,A',D_A^f) не отвечают цепочному критерию. Из-за гомоморфизма (6) исключаются триады $(G,H',D_G^j=\varphi^{-1}(D_A^{f,c}))$ для всех цветных групп $G/H'/H(A,A')_n$ данного хромоморфного класса. Отметим, что если для (G,H',D_G^j) удовлетворяется цепочный критерий (Г), то автоматически удовлетворяются и критерии (А),(Б),(В), однако их последовательное применение радикальным образом облегчает проверку условия (Г).

Выведенные в работе[18] "изотропные подгруппы" пространственных групп совпадают с теми подгруппами $H'\subset G$, которые удовлетворяют условию (Г).

Условие Д. Условие Ландау об отсутствии в термодинамическом потенциале инвариантов третьей степени (D_G^1 не должно содержаться в симметризованном кубе представления D_G^j) также проверяется одновременно для всех групп $G/H'/H(A,A')_n$ данного хромоморфного класса:

$$([D_G^j]^3 \mid D_G^1) = ([D_A^j]^3 \mid D_A^1) = 0, \tag{18}$$

где $D_G^j = \varphi^{-1}(D_A^j)$. Отсюда, на базе теории цветных групп элементарно доказываются[8] некоторые общие теоремы теории Ландау: все ФП с двукратным понижением симметрии (n=2) могут быть переходами второго рода, а с трехкратным понижением (n=3) – нет. Это видно из таблицы: все упомянутые ФП описываются цветными группами хромоморфных классов $(C_2,C_1)_2$ и $(C_3,C_1)_3$, $(D_3,C_2)_3$ соответственно. (В таблице верхним индексом "s" отмечены D_A^f, не удовлетворяющие условию Ландау).

Поясним содержание приведенной ниже таблицы. В первом столбце даны символы 45 классов хромоморфизма цветных групп, где горизонтальные линии отделяют классы $(A,A')_n$ с изоморфными группами A. В строке за каждым символом $(A,A')_n$ дается разложение перестановочного представления $D_A^{A'}$ на неприводимые компоненты $D_A^j=\Gamma_j$ (в скобки заключены комплексно-сопряженные Γ_j, образующие "физически неприводимое представление"). Верхние индексы неприводимых представлений Γ_j имеют следующий смысл: "f" – точное представление; "c" – нарушается условие (Г); "s" – нарушается условие (Д). В следующих столбцах приводится число выведенных нами цветных пространственных групп данного класса: группы с одноцветной трансляционной подгруппой $G_I^{(p)}=T^{(1)}\hat{G}^{(p)}$; группы с цветной трансляционной подгруппой $G_{II}^{(p)}=T^{(p')}\hat{G}^{(p)}$; полное число выведенных групп (лишь для кубических хромоморфных классов). Вслед за этим дается число групп, выведенных другими авторами (при другом определении эквивалентности). Одной или двумя звездочками отмечена допустимость ФП I или II рода для всех цветных групп данного хромоморфного класса (Γ_j^f с или без дополнителного индекса "s"), а черточка означает, что для всех цветных групп $G/H'/H(A,A')_n$ класса $(A,A')_n$ исключается возможность ФП $G \rightarrow H'$ по неприводимым представлениям. Подчеркнем, что список[11,17] групп $G_I^{(p)}=T^{(1)}\hat{G}^{(p)}$ является исчерпывающим: любая группа с одноцветной решеткой эквивалентна одной из 2571. Все ФП $G \rightarrow H'$ без изменения трансляционной симметрии (например, все ферромагнитные ФП) описываются этими группами, где как основные, так и вторичные параметры порядка преобразуются по $D_G^j \in D_G^{H'}$. Число групп с цветными трансляциями $G_{II}^{(p)}=T^{(p')}\hat{G}^{(p)}$ бесконечно, однако каждому хромоморфному классу с конечной группой A принадлежит конечное число групп $G_{II}^{(p)}$. Выведенные нами[16] списки цветных групп для 26 кубических классов хромоморфизма (см. таблицу) также являются полными. Этими классами исчерпываются все транзитивные перестановочные представления $D_A^{A'}$, которые могут содержать трехмерные точные физически неприводимые представления. Следовательно, любой ФП $G \rightarrow H'$ с трехкомпонентным параметром порядка ($\dim D_G^j = 3$, $D_G^j \in D_G^{H'}$) описывается одной из 2801 цветных групп кубических классов хромоморфизма. Число групп, выведенных другими авторами (см.[1-3]) при ином определении эквивалентности, дано в предпоследнем столбце.

Следует особо остановиться на последнем столбце таблицы. В нем для каждого блока изоморфных групп $(A,A')_n$ даны символы матричных групп $L \subset O(m)$, $m = 1,2,3$, образов неприводимых представлений D_G^j, где $\mathrm{Ker}D_G^j = H$ и $L \simeq G/H$. Каждая группа L соответствует одному D_A^f или классу из нескольких "квазиэквивалентных"[15] точных неприводимых представлений группы A. (Неэквивалентные неприводимые представления D_A^j и $D_A^{j'}$ "квазиэквивалентны", если они сопряжены элементом группы внешних автоморфизмов группы A, т.е. $D_A^{j'}(a) = D_A^j(\alpha(a))$, $a \in A$, $\alpha \in \mathrm{Out}A$. Например, группа L = C48a (см.[13]) соответствует двум "квазиэквивалентным" точным неприводимым представлениям Γ_{4u} и Γ_{5u} группы $A \simeq O_h$, а в группе $A \simeq O \simeq T_d$ представления Γ_4 и Γ_5 не связаны ее внешним автоморфизмом и им соответствуют группы L = C24c и L =C24b). Группы L положены в основу разработанного Гуфаном с сотрудниками мощного группового метода анализа структурных фазовых переходов в кристаллах (см.[13] и цитированную там литературу, а также [14,15,18]). Из таблицы видно, что хромоморфная классификация позволяет существенно детализировать классификацию подгрупповых соотношений: данной $L \simeq A$ соответствуют несколко классов $(A,A')_n$, т.е. диады $\{G,D_G^j\}$ расщепляются на массивы триад $\{G,H',D_G^j\}$ с различным характером перехода. В то время как группы $L \simeq G/\mathrm{Ker}D_G^j$ выводятся на базе единственного D_G^j (ответственного за переход), в цветно-групповом подходе учитываются все представления, которые дают вклад в понижающую симметрию часть $\delta\rho$ функции плотности. Это позволяет учесть все основные и вторичные параметры порядка, а также анализировать ФП по приводимым представлениям группы G – случай, довольно распространенный в реальном мире.

Итак, разработанный на базе теории групповых расширений эффективный метод вывода цветных пространственных групп позволил нам получить и протабулировать все группы $G_I^{(p)}$ с одноцветной решеткой, а также и все группы $G_{II}^{(p)}$ с цветной решеткой для кубических хромоморфных классов (см. таблицу). Симметрийный анализ ФП в кристаллах на базе теории и таблиц цветных пространственных групп и их перестановочных представлений не только включает все результаты традиционных групповых методов, но и (в сочетании с ними) превосходит их по общности и эффективности.

Таблица: Классификация цветных групп

$(A,A')_n$	Разложение $D_A^{A'} = \sum (D_A^{A'} \mid D_A^j)\ D_A^j$	$G_I^{(p)}$	$G_{II}^{(p)}$	Всего	Другие	L
1	2	3	4	5	6	7
$(C_1,C_1)_1$	$\Gamma_1^{f,c}$	230	–	230—	230	A1a
$(C_2,C_1)_2$	$\Gamma_1+\Gamma_2^f$	750		? **	1191	A2a
$(C_3,C_1)_3$	$\Gamma_1+(\Gamma_2+\Gamma_3)^{f,s}$	27		? *	111	B3a
$(C_4,C_1)_4$	$\Gamma_1+\Gamma_2+(\Gamma_3+\Gamma_4)^f$	20		? **	327	B4a
$(C_6,C_1)_6$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4+(\Gamma_5+\Gamma_6)^f$	22		? **	379	B6b
$(C_{4h},C_1)_8$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+$	6		? —	638	
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}$					
$(C_{6h},C_1)_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+\Gamma_{5g}+\Gamma_{6g}$	2		? —		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}+\Gamma_{5u}+\Gamma_{6u}$					
$(D_2,C_1)_4$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4$	473		? —	1843	
$(D_{2h},C_1)_8$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+$	52		? —	836	
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}$					
$(D_3,C_1)_6$	$\Gamma_1+\Gamma_2+2\Gamma_3^{f,s}$	61		? *	309	B6a
$(D_3,C_2)_3$	$\Gamma_1+\Gamma_3^{f,s}$	61		? *	309	
$(D_4,C_1)_8$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4+2\Gamma_5^f$	74		? **	537	B8a
$(D_4,C_2')_4$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_5^f$	148		? **	1667	
$(D_{4h},C_1)_{16}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+2\Gamma_{5g}+$	20		? —		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}+2\Gamma_{5u}$					
$(D_{4h},C_2')_8$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{5g}+\Gamma_{1u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{5u}$	80		? —		
$(D_6,C_1)_{12}$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4+2\Gamma_5^f+2\Gamma_6$	42		? **	953	B12a
$(D_6,C_2')_6$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_5^f+\Gamma_6$	84		? **	1644	
$(D_{6h},C_1)_{24}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+2\Gamma_{5g}+2\Gamma_{6g}$	4		? —		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}+2\Gamma_{5u}+2\Gamma_{6u}$					
$(D_{6h},C_2')_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{5g}+\Gamma_{6g}$	16		? —		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{5u}+\Gamma_{6u}$					

1	2	3	4	5	6	7
$(T,C_1)_{12}$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+3\Gamma_4^{f,s}$	12	31	43*		
$(T,C_2)_6$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_3+\Gamma_4^{f,s}$	12	31	43*		C12a
$(T,C_3)_4$	$\Gamma_1+\Gamma_4^{f,s}$	12	31	43*	35	
$(T_h,C_1)_{24}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+3\Gamma_{4g}+\Gamma_{1u}+$	7	66	73**		
	$+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+3\Gamma_{4u}^f$					
$(T_h,C_2)_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+$	7	66	73—		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}^{f,c}$					C24a
$(T_h,C_s)_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+2\Gamma_{4u}^f$	7	66	73**		
$(T_h,C_3)_8$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{4g}+\Gamma_{1u}+\Gamma_{4u}^f$	7	66	73**	53	
$(T_h,C_{2v})_6$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4u}^f$	7	66	73**		
$(O,C_1)_{24}$	$\Gamma_1+\Gamma_2+2\Gamma_3+3\Gamma_4^f+3\Gamma_5^{f,s}$	24	61	85**		
$(O,C_2)_{12}$	$\Gamma_1+\Gamma_2+2\Gamma_3+\Gamma_4^{f,c}+\Gamma_5^{f,s,c}$	24	61	85—		C24c (Γ_4)
$(O,C_2')_{12}$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_4^f+2\Gamma_5^{f,s}$	24	61	85**		
$(O,C_3)_8$	$\Gamma_1+\Gamma_2+\Gamma_4^f+\Gamma_5^{f,s,c}$	24	61	85**		C24b
$(O,C_4)_6$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_4^f$	24	61	85**		(Γ_5)
$(O,D_2')_6$	$\Gamma_1+\Gamma_3+\Gamma_5^{f,s}$	24	61	85*		
$(O,D_3)_4$	$\Gamma_1+\Gamma_5^{f,s}$	24	61	85*	74	
$(O_h,C_1)_{48}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+2\Gamma_{3g}+3\Gamma_{4g}+3\Gamma_{5g}+$	10	97	107**		
	$\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+2\Gamma_{3u}+3\Gamma_{4u}^f+3\Gamma_{5u}^f$					
$(O_h,C_2)_{24}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+2\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+\Gamma_{5g}+$	10	97	107—		
	$\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+2\Gamma_{3u}+\Gamma_{4u}^{f,c}+\Gamma_{5u}^{f,c}$					
$(O_h,C_s)_{24}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+2\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+\Gamma_{5g}+$	10	97	107**		C48a
	$+2\Gamma_{4u}^f+2\Gamma_{5u}^f$					
$(O_h,C_2')_{24}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+2\Gamma_{5g}+\Gamma_{1u}+\Gamma_{3u}+$	20	194	214**		
	$+\Gamma_{4u}^{f,c}+2\Gamma_{5u}^f\ (\Gamma_{5u}^{f,c}+2\Gamma_{4u}^f)$					
$(O_h,C_3)_{16}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+\Gamma_{4g}+\Gamma_{5g}+$	10	97	107—		
	$+\Gamma_{1u}+\Gamma_{2u}+\Gamma_{4u}^{f,c}+\Gamma_{5u}^{f,c}$					

1	2	3	4	5	6	7
$(O_h,C_4)_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{4g}+$ $+\Gamma_{1u}+\Gamma_{3u}+\Gamma^{f,c}_{4u}$ $(\Gamma^{f,c}_{5u})$	20	194	214—		
$(O_h,C_{2v})_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{2g}+2\Gamma_{3g}+\Gamma^{f,c}_{4u}+\Gamma^{f,c}_{5u}$	10	97	107—		C48a
$(O_h,D'_2)_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{5g}+$ $+\Gamma_{1u}+\Gamma_{3u}+\Gamma^{f,c}_{5u}$ $(\Gamma^{f,c}_{4u})$	20	194	214—		
$(O_h,C''_{2v})_{12}$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma_{5g}+\Gamma^{f}_{4u}+\Gamma^{f}_{5u}$	10	97	107**		
$(O_h,D_3)_8$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{5g}+\Gamma_{1u}+\Gamma^{f}_{5u}$ (Γ^{f}_{4u})	20	194	214**	150	
$(O_h,C_{4v})_6$	$\Gamma_{1g}+\Gamma_{3g}+\Gamma^{f}_{4u}$ (Γ^{f}_{5u})	20	194	214**		
$45(A,A')_n$	Σ	2571	2402	(2801)		

ЛИТЕРАТУРА

1. Шубников А.В., Копцик В.А. Симметрия в науке и искусстве. М: Наука, 1972.
2. Заморзаев А.М., Галярский Е.И., Палистрант А.Ф. Цветная симметрия, ее обобщения и приложения. Кишинев: Штиинца, 1978.
3. Заморзаев А.М., Карпова Ю.С., Лунгу А.П., Палистрант А.Ф. Р-Симметрия и ее дальнейшее развитие. Кишинев: Штиинца, 1986.
4. Kotzev J.N.- MATCH (Comm.Math.Chem.), 1980, v.9, p. 41.
5. Schwarzenberger R.L.E.-Bull. London Math. Soc.,1984, v.16, p.209.
6. Копцик В.А., Коцев Й.Н.- Сообщения ОИЯИ, 1974, Р4-8067, Р4-8068, Дубна.
7. Waerden B.L.Van der, Burckhardt J.J.- Z.Kristallogr., 1961,v.115, p.231.
8. Kotzev J.N., Litvin D.B., Birman J.N. - Physica A, 1982, v. 114A, p.576.
9. Litvin D.B., Kotzev J.N., Birman J.N.- Phys. Rev. B, 1982, v.26, p.6947.
10. Коцев Й.Н., Копцик В.А., Рустамов К.А.- в кн.: "Теоретико-групповые методы в физике (Труды Международного семинара, Звенигород, 1982)", (под ред. М.А.Маркова). М.: Наука, 1983, т.1, с.332.
11. Коцев Й.Н., Александрова Д.А.-в кн.: "Теоретико-групповые методы в физике (Труды Международного семинара, Юрмала,1985)", (под ред. М.А.Маркова). М.: Наука, 1986, т.1, с.689.
12. Berenson R., Kotzev J.N., Litvin D.B.- Phys. Rev. B, 1982, v. 25, p.7523.
13. Гуфан Ю.М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982.
14. Изюмов Ю.А., Сыромятников В.Н. Фазовые переходы и симметрия кристаллов. М.: Наука, 1984.
15. Michel L. - Revs.Mod.Phys., 1980, v.52, p.617.
16. Kotzev J.N., Alexandrova D.A.- The Tenth European Cryst. Meeting, Wroclaw,1986, Coll. Abstracts, p.513.
17. Kotzev J.N., Alexandrova D.A.- Acta Cryst.A, 1988, v.A44, p.1170.
18. Stokes H.T., Hatch D.M., Kim J.S.- Acta Cryst.A, 1987,v.A43, p.81.
19. Ascher E.- J. Phys. C., 1977, v. 10, p. 1365.

Рукопись поступила в издательский отдел
4 июля 1988 года.

Коцев Й.Н., Александрова Д.А. Р17-88-482

Цветные пространственные группы: классификация и применение в теории фазовых переходов в кристаллах

Рассматриваются "цветные" кристаллографические пространственные группы Р-типа /дискретные подгруппы прямого произведения эвклидовой группы E(3) на группу S_n n "цветов"/ и связанные с ними перестановочные представления. Дано их распределение по классам "хромоморфизма", а также алгоритм вывода этих групп на базе теории групповых расширений. Показана возможность их эффективного применения в теории фазовых переходов в кристаллах.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1988

Перевод авторов

Kotzev J.N., Alexandrova D.A. P17-88-482

Colour Space Groups: Classification and Application in the Landau Theory of Phase Transitions

The colour P-type crystallographic groups (discrete subgroups of the direct product of the Euclidean group E(3) and the symmetric group S_n) are discussed. An algotithm for deriving these groups is given. It is based on the theory of group extensions and also on the induced representations of the space groups. The derived colour groups are classified in "chromomorphic classes". The possibility for their application in phase transition analysis is also shown.

The investigation has been performed at the Laboratory of Theoretical Physics, JINR.

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1988