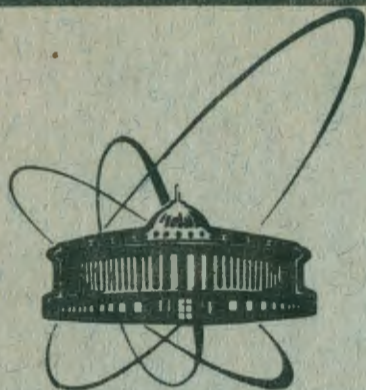


89-782



сообщения
объединенного
института
ядерных
исследований
дубна

K 754

P17-89-782 E +

Й.Н.Коцев, Д.А.Александрова*

ЦВЕТНЫЕ ПРОСТРАНСТВЕННЫЕ ГРУППЫ
И ИХ ПРИМЕНЕНИЕ

ПРИ АНАЛИЗЕ ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ.

Тетраэдрический класс хромоморфизма

*Софийский университет им. Климента Охридского, НРБ

1989

1. ВВЕДЕНИЕ

В последние десятилетия в физике, математике и кристаллографии изучаются и применяются различные группы обобщенной симметрии, известные как "цветные группы" /1-7/. В настоящей работе рассматривается лишь один тип цветных групп - пространственные группы P-симметрии /2-6/ $G^{(p)}$, изоморфные федоровским группам, где преобразование цветов осуществляется подстановками из транзитивной подгруппы P симметрической группы S_n . С математической точки зрения - это группы автоморфизмов трехмерных пространственных решеток, каждый из узлов которых определенным образом "окрашен" одним из n цветов. Гораздо богаче интерпретация и применение этих групп в физике кристаллов - чаще всего как групп симметрии скалярных, векторных и тензорных функций, определенных на узлах кристаллической решетки.

Особенно эффективным оказалось применение групп P-симметрии при теоретико-групповом анализе фазовых переходов (ФП) в рамках теории Ландау /8-11/. Для этого, однако, необходимо иметь соответствующие таблицы цветных пространственных групп (ЦПГ) и их транзитивных перестановочных представлений (ТПП) /9, 12-15/. В работе /14/ приведены полные таблицы ЦПГ с "одноцветной" (сохраняющей все цвета) решеткой (их число конечно - 2571), где соответствующие ТПП разлагаются по неприводимым представлениям (НП) пространственных групп с вектором $k = 0$. Этими группами описываются ФП без изменения трансляционной симметрии кристалла (ферромагнитные, сегнетоэлектрические и др.).

Для анализа ФП с изменением объема элементарной ячейки (и для ряда других задач) необходимо иметь таблицы ЦПГ с "цветной" трансляционной подгруппой, в чьи разложения ТПП входят НП с $k \neq 0$. Если ограничиться наиболее интересными для физики случаями, где векторы k связаны с точками выделенной симметрии на поверхности зоны Бриллюэна (т.н. лифшицевские точки), то соответствующие НП входят в конечное число ТПП конечной размерности n , а для каждого n - число возможных ЦПГ также конечно. Вывод и табулирование всех ЦПГ, даже для небольших n , - трудоемкая и нетривиальная задача. Поэтому целесообразно протабулировать прежде всего наиболее полезные для физических применений группы. Отметим, что до сих пор выводились и публиковались лишь списки групп (см. /2, 3, 16/ и цитируемые там источники), что радикально ограничивало возможность их конкретного

использования в физике (исключение составляет щёбниковские группы и группы с одноцветной решеткой^{/14/}).

В этой связи представляется целесообразным приступить к выводу таблиц ЦПГ и их ТПП для групп, относящихся к 26 кубическим классам хромоморфизма^{/10/} (в них группы подстановок цветов изоморфны одной из точечных групп кубической сингонии, $P \cong T, T_h, O, O_h$). Существенно, что трехмерные НП пространственных групп входят только в ТПП ЦПГ этих классов, т.е. последними исчерпываются все ЦПГ, необходимые для анализа ФП с трехкомпонентным параметром порядка^{/17/}. Метод вывода и классификация упомянутых групп приводились ранее^{/11,15,18/}.

В настоящей работе впервые даются полные таблицы цветных пространственных групп и их транзитивных перестановочных представлений для хромоморфных классов, изоморфных группе тетраэдра.

2. СТРУКТУРА ЦПГ И МЕТОД ИХ ВЫВОДА

По определению^{/1-7/}, изоморфные федоровским группам G цветные группы $G^{(P)}$ являются подпрямыми произведениями^{/12/} групп G и $P \subseteq S_n$:

$$G^{(P)} = \left\{ (p; g) \mid p = \pi_G^{H'}(g) \in P, g \in G, \pi_G^{H'}: G \rightarrow P \subseteq S_n \right\} \subseteq P \times G. \quad (1)$$

Здесь гомоморфизм $\pi_G^{H'}: g \rightarrow p$ определяется посредством подстановки (под действием $g \in G$ слева) левых смежных классов $a_i H'$ в разложении группы G по ее подгруппе $H' \subseteq G$ индекса $[G:H']=n$. Группа P есть образ построенного таким способом транзитивного перестановочного представления $D_G^{H'}$ группы G :

$$P = \pi_G^{H'}(G) = \text{Im } D_G^{H'}. \quad (2)$$

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

$$\text{Ker } D_G^{H'} = \text{Ker } \pi_G^{H'} = H \subseteq G \quad (3)$$

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

$$H = \bigcap_{g \in G} g H' g^{-1} \subseteq G. \quad (4)$$

Важную роль в теории цветных групп играют абстрактные группы A и $A' \subseteq A$, изоморфные фактор-группам G/H и H'/H :

$$\begin{aligned} A &\cong G/H \cong P \subseteq S_n, \\ A' &\cong H'/H, \end{aligned} \quad (5)$$

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

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

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

$$G^{(P)} \cong G / H' / H (A, A')_n, \quad (7)$$

несет в себе содержащуюся в (6) информацию и однозначно характеризует соответствующие цветные группы: символом (7) обозначена n -цветная группа, изоморфная кристаллографической группе G и принадлежащая классу хромоморфизма $(A, A')_n$; ее максимальная "одноцветная" (т.е. сохраняющая все цвета) подгруппа $H^{(1)}$ изоморфна инвариантной подгруппе $H = \text{Ker } D_G^{H'}$, а максимальная подгруппа, сохраняющая хотя бы один цвет, изоморфна подгруппе H' индекса n в G .

Две ЦПГ, порожденные данной группой G , считаются эквивалентными, если соответствующие им подгруппы H' сопряжены в G .

Любая группа (7) может быть построена как расширение ее одноцветной подгруппы $H^{(1)} \cong H$ с помощью транзитивной группы подстановок P , что изображается точной последовательностью морфизмов

$$C_1 \rightarrow H^{(1)} \rightarrow G^{(P)} \rightarrow P \rightarrow C_1. \quad (8)$$

С другой стороны, любая федоровская группа является расширением своей трансляционной подгруппы T с помощью точечной группы $\hat{G} \cong G/H$,

$$C_1 \rightarrow T \rightarrow G \rightarrow \hat{G} \rightarrow C_1. \quad (9)$$

Комбинируя эти два расширения и учитывая изоморфизм групп P и A , можно показать, что основой для вывода цветных пространственных групп служат коммутативные диаграммы следующего вида:

$$\begin{array}{ccccc}
 & C_1 & & C_1 & & C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & T_H & \rightarrow & T & \rightarrow & A_T \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & H & \rightarrow & B & \rightarrow & A \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & \hat{H} & \rightarrow & \hat{B} & \rightarrow & \hat{A} \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 & C_1 & & C_1 & & C_1
 \end{array} \quad (10)$$

$$\begin{array}{ccccc}
 & C_1 & & C_1 & & C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & T_H & \rightarrow & T' & \rightarrow & A'_T \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & H & \rightarrow & H' & \rightarrow & A' \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 C_1 & \rightarrow & \hat{H} & \rightarrow & \hat{H}' & \rightarrow & \hat{A}' \rightarrow C_1 \\
 & \downarrow & & \downarrow & & \downarrow \\
 & C_1 & & C_1 & & C_1
 \end{array} \quad (11)$$

Факторизация абстрактных групп A и A' ,

$$\begin{array}{ccccccc}
 C_1 & \rightarrow & A_T & \rightarrow & A & \rightarrow & \hat{A} \rightarrow C_1, \\
 & & U & & U & & U \\
 C_1 & \rightarrow & A'_T & \rightarrow & A' & \rightarrow & \hat{A}' \rightarrow C_1,
 \end{array} \quad (12)$$

следует непосредственно из (9)-(11). Для рассматриваемого здесь случая результаты сведены в табл. 2.

Не вдаваясь в детали, отметим, что при выводе ЦПГ использовались неприводимые представления федоровских групп^{/19/}.

Рассмотрим теперь транзитивные перестановочные представления $D_G^{H^*}$ групп G . Они могут быть построены как прообразы

$$\varphi^{-1}(D_A^{A'}) = D_G^{H^*} = \sum_j (D_G^{H^*} | D_G^j) D_G^j \quad (13)$$

соответствующих ТПП абстрактных групп D_A^A , а их неприводимые

компоненты D_G^j являются прообразами неприводимых составляющих $D_A^j \in D_A^A$.

$$D_A^{A'} = \sum_j (D_A^A | D_A^j) D_A^j. \quad (14)$$

Необходимо отметить, что $\text{Ker } D_G^j = H$ только в том случае, если D_A^j является точным неприводимым представлением абстрактной группы A .

В табл. 1 даны изоморфные группе тетраэдра транзитивные подгруппы P и разложение (14) соответствующих образов ТПП. Во всех классах трехмерное точное НП $D_A^j = \Gamma_4$ группы $A=T$ порождает трехмерные НП пространственных групп G . Отыскивая в таблицах Ковалева^{/19/} все трехмерные НП и выявляя их ядра $H = \text{Ker } D_G^j$, обнаруживаем, что лишь в 27 из 230 групп G возможны фактор-группы G/H , изоморфные группе тетраэдра T (см. таблицу 3). После этого для каждой пары (G, H) необходимо определить подгруппы H^* , удовлетворяющие условиям (3)-(6). Из каждого класса сопряженных подгрупп выбирается по одному представителю. Это позволяет составить "трехчленные символы" $G/H^*/H$ для рассматриваемых групп - всего 129. Процедура заканчивается построением ТПП $D_G^{H^*}$ и их разложением на неприводимые компоненты.

Результаты сведены в табл. 4, в левой части которой приводятся полные символы (7) ЦПГ, а в правой - числа $(D_G^{H^*} | D_G^j)$, т.е. кратность вхождения НП D_G^j в ТПП $D_G^{H^*}$. В трех средних столбцах содержится информация, необходимая для идентификации подгруппы H^* : матрицы m_i выражают элементарные трансляции подгруппы через элементарные трансляции группы; вектор t_0 отражает соответствующее смещение начала координат; векторы t_i являются дополнительными трансляциями для генераторов подгруппы (трансляции в группе G , которые становятся тривиальными в решетке T^* подгруппы H^*). Для удобства записи в графе 4 дается номер поворотного генератора подгруппы по таблицам^{/19/} и вслед за ним - компоненты вектора t_i , если он отличен от нуля.

3. ПРИМЕНЕНИЕ ТАБЛИЦ ДЛЯ АНАЛИЗА ФАЗОВЫХ ПЕРЕХОДОВ

При теоретико-групповом анализе ФП в рамках теории Ландау прежде всего определяются группы симметрии G и H^* высоко- и низкосимметричной фазы и НП группы G , по которому преобразуются компоненты параметра порядка. Известно, что далеко не все НП и подгруппы удовлетворяют необходимым условиям (т.н. групповым критериям - см., напр.,^{/8,9,11,17/}). В табл. 4 числа, отмеченные звездочкой, находятся на пересечении столбца с допустимым НП и строки с цветной группой, дающей символы групп G и H^* (первая и вторая группы в символе ЦПГ). Во всех остальных случаях триады (G, H^*, D_G^j) не могут быть связаны с ФП.

Например, из последней строки табл.4 следует, что при ФП с понижением симметрии от $Fm\bar{3}$ до $Fa\bar{3}$ параметр порядка преобразуется по НП T_5^{10} звезды вектора k_{10} (см. /19/). Это НП допускает инвариант третьего порядка в термодинамическом потенциале - ФП 8чет I рода (это отмечено верхним индексом "s" у символа НП, который означает нарушение условия стабильности по Ландау; индексом "h" отмечается нарушение условия Лифшица об "однородности" фазы). Из табл.1 можно сделать и более общий вывод: во всех перечисленных в табл.4 случаях единственно допустимое НП - трехмерное, и оно не удовлетворяет условию Ландау. Во всех случаях ФП не могут быть непрерывными.

Таблица 1. Транзитивные перестановочные представления группы T

$(A, A')_n \subset S_n$	$A = \langle a^3 = b^2 = (ba)^3 = e \rangle$	$D_A^{A'} = \sum_j (D_A^{A'} D_A^j) D_A^j$
$(T, C_3)_4 \subset S_4$	$a = (1, 2, 3) (4)$ $b = (1, 2) (3, 4)$	$\Gamma_1 + {}^s\Gamma_4^f$
$(T, C_2)_6 \subset S_6$	$a = (1, 2, 3) (4, 5, 6)$ $b = (1, 4) (3) (2, 5) (6)$	$\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + {}^s\Gamma_4^f$
$(T, C_1)_{12} \subset S_{12}$	$a = (1, 2, 3) (4, 5, 6) (7, 8, 9) (10, 11, 12)$ $b = (1, 12) (2, 9) (3, 5) (4, 10) (6, 8) (7, 11)$	$\Gamma_1 + \Gamma_2 + \Gamma_3 + 3{}^s\Gamma_4^f$

Таблица 2. Факторизация группы A и A', $A \cong T$

$A = A_T \hat{s} \hat{A}$	$A' = A'_T \hat{s} \hat{A}'$	$[A: A']$	$[T: T']$	$[\hat{A}: \hat{A}']$
	$C_1 = C_1 \times C_1$	12	1	12
$T = C_1 \times T$	$C_2 = C_1 \times C_2$	6	1	6
	$C_3 = C_1 \times C_3$	4	1	4
	$C_1 = C_1 \times C_1$	12	4	3
$T = D_2 \hat{s} C_3$	$C_2 = C_2 \times C_1$	6	2	3
	$C_3 = C_1 \times C_3$	4	4	1

Таблица 3. Классификация групп $B^{(P)}$ по $B \cong B^{(P)}$

B	B 1 класс	Всего	B	B 1 класс	Всего
C_3^{1-4}	0 + 1	12	$T^{1,2}$	1 + 4 (2)	30 (18)
$S_6^{1,2}$	0 + 1	6	T_h^1	1 + 4 (2)	15 (9)
C_6^{1-6}	0 + 1	18	T^{3-5}	1 + 0	9
C_{3h}^1	0 + 1	3	$T_h^{2,4-7}$	1 + 0	15
$C_{6h}^{1,2}$	0 + 1	6	T_h^3	1 + 4 (3)	15 (12)
		Всего		12 + 31 (24)	129 (108)

Таблица 4. Цветные группы и их перестановочные представления

$G/H/H' (A, A')_n$	m	$t_i \equiv t_i$	τ_0	$(D_6^H D_6^j)$
$G^{(P)} \cong P3$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^{12}$
$P3/P1(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P3/P1/P1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P3/P3/P1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P3_1$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^{12}$
$P3_1/P1(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P3_1/P1/P1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P3_1/P3_1/P1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P3_2$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^{12}$
$P3_2/P1(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P3_2/P1/P1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P3_2/P3_2/P1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong R3$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^5$
$R3/P1(T, C_1)_{12}$	m_3			1 1 1 3*
$R3/P1/P1(T, C_2)_6$	m_4			1 1 1 1*
$R3/R3/P1(T, C_3)_4$	m_3			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P\bar{3}$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^{12}$
$P\bar{3}/P\bar{1}(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P\bar{3}/P\bar{1}/P\bar{1}(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P\bar{3}/P\bar{3}/P\bar{1}(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong R\bar{3}$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_2 \quad \Gamma_3)^h \quad {}^s\Gamma_1^5$
$R\bar{3}/P\bar{1}(T, C_1)_{12}$	m_3			1 1 1 3*
$R\bar{3}/P\bar{1}/P\bar{1}(T, C_2)_6$	m_4			1 1 1 1*
$R\bar{3}/R\bar{3}/P\bar{1}(T, C_3)_4$	m_3			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6$				${}^s\Gamma_1 \quad {}^s(\Gamma_3 \quad \Gamma_5)^h \quad {}^s\Gamma_1^{12}$
$P6/P2(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6/P2/P2(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6/P6/P2(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*

1	2	3	4	5
$G^{(P)} \cong P6_1$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5)^h s\gamma_1^{12}$
$P6_1/P2_1(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6_1/P2_1/P2_1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6_1/P6_1/P2_1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6_5$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5)^h s\gamma_1^{12}$
$P6_5/P2_1(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6_5/P2_1/P2_1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6_5/P6_5/P2_1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6_2$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5)^h s\gamma_1^{12}$
$P6_2/P2(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6_2/P2/P2(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6_2/P6_2/P2(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6_4$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5)^h s\gamma_1^{12}$
$P6_4/P2(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6_4/P2/P2(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6_4/P6_4/P2(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6_3$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5)^h s\gamma_1^{12}$
$P6_3/P2_3(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6_3/P2_1/P2_1(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6_3/P6_3/P2_1(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P\bar{6}$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_3 \Gamma_5) s\gamma_1^{12}$
$P\bar{6}/Pm(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P\bar{6}/Pm/Pm(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P\bar{6}/P\bar{6}/Pm(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong P6/m$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_5 \Gamma_9) s\gamma_1^{12}$
$P6/m/P2/m(T, C_1)_{12}$	m_1			1 1 1 3*
$P6/m/P2/m/P2/m(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 1*
$P6/m/P6/m/P2/m(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*

1	2	3	4	5
$G^{(P)} \cong F6_3/m$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_2 \Gamma_3) s\gamma_1^{12}$
$F6_3/m/P2_1/m(T, C_1)_{12}$	m_1		$(0, 0, \frac{1}{4})$	1 1 1 3*
$F6_3/m/P2_1/m/P2_1/m(T, C_2)_6$	m_2		$(0, 0, \frac{1}{4})$	1 1 1 1*
$F6_3/m/P6_3/m/P2_1/m(T, C_3)_4$	m_1			1 . . 1*
$G^{(P)} \cong F23$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_2 \Gamma_3) s\gamma_4^{11} s\gamma_1^{11}$
$F23/I222(T, C_1)_{12}$	m_3			1 1 1 . 3*
$F23/C222/I222(T, C_2)_6$	m_2			1 1 1 . 1*
$F23/I23/I222(T, C_3)_4$	m_3			1 . . . 1*
$F23/I222(T, C_1)_{12}$	m_3	$t2=(100)$ $t3=(010)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1 1 1 3*
$F23/C222/I222(T, C_2)_6$	m_2	$t2=(100)$ $t3=(100)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1 1 1 1*
$F23/I23/I222(T, C_3)_4$	m_3	$t2=(100)$ $t5=(000)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1 . . 1*
				$s\Gamma_1^s (\Gamma_2 \Gamma_3) s\gamma_3^{11} s\gamma_2^{11}$
$F23/I2_1 2_1 2_1(T, C_1)_{12}$	m_3	$t2=(001)$ $t3=(100)$		1 1 1 . 3*
$F23/C222/I2_1 2_1 2_1(T, C_2)_6$	m_2	$t2=(000)$ $t3=(100)$	$(\frac{1}{2}, 0, 0)$	1 1 1 . 1*
$F23/I213/I2_1 2_1 2_1(T, C_3)_4$	m_3	$t2=(001)$ $t5=(000)$		1 . . . 1*
$F23/I2_1 2_1 2_1(T, C_1)_{12}$	m_3	$t2=(010)$ $t3=(001)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1 1 1 3*
$F23/C222/I2_1 2_1 2_1(T, C_2)_6$	m_2	$t2=(100)$ $t3=(000)$	$(0, \frac{1}{2}, 0)$	1 1 1 1*
$F23/I2_1 3/I2_1 2_1 2_1(T, C_3)_4$	m_3	$t2=(010)$ $t5=(000)$	$(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$	1 . . 1*
$G^{(P)} \cong F23$				$s\Gamma_1^s (\Gamma_2 \Gamma_3) s\gamma_4^{10} s\gamma_1^{10}$
$F23/P222(T, C_1)_{12}$	m_3			1 1 1 . 3*
$F23/C222/P222(T, C_2)_6$	m_5			1 1 1 . 1*
$F23/P23/P222(T, C_3)_4$	m_3			1 . . . 1*
$F23/P222(T, C_1)_{12}$	m_3	$t2=(100)$ $t3=(010)$	$(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$	1 1 1 3*
$F23/C222/P222(T, C_2)_6$	m_5	$t2=(010)$ $t3=(010)$	$(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, -\frac{1}{4})$	1 1 1 1*
$F23/P23/P222(T, C_3)_4$	m_3	$t2=(100)$ $t5=(000)$	$(\frac{3}{4}, \frac{3}{4}, \frac{3}{4})$	1 . . 1*

1	2	3	4	5
				$s_{\Gamma_1^5} (r_2 \ r_3) \ s_{\Gamma_3^{10}} \ s_{\Gamma_2^{10}}$
F23/P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(001) t3=(100)		1 1 1 . 3*
F23/C222 ₁ /P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₂) ₆	m ₅	t2=(000) t3=(010)	(0, 1/2, 0)	1 1 1 . 1*
F23/P2 ₁ 3/P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(001) t5=(000)		1 . . . 1*
F23/P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(010) t3=(001)	(3/4, 3/4, 3/4)	1 1 1 3*
F23/C222 ₁ /P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₂) ₆	m ₅	t2=(010) t3=(000)	(-1/4, 1/4, 3/4)	1 1 1 1*
F23/P2 ₁ 3/P2 ₁ 2 ₁ 2 ₁ (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(010) t5=(000)	(3/4, 3/4, 3/4)	1 . . 1*
G ^(P) ≅ Pm $\bar{3}$				$s_{\Gamma_1^5} (r_3 \ r_5)^h \ s_{\Gamma_7^{11}} \ s_{\Gamma_1^{11}}$
Pm $\bar{3}$ /Immm (T, C ₁) ₁₂	m ₃			1 1 1 . 3*
Pm $\bar{3}$ /Cmmm/Immm (T, C ₂) ₆	m ₂			1 1 1 . 1*
Pm $\bar{3}$ /Im $\bar{3}$ /Immm (T, C ₃) ₄	m ₃			1 . . . 1*
Pm $\bar{3}$ /Immm (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(100) t3=(010) t25=(000)	(1/2, 1/2, 1/2)	1 1 1 3*
Pm $\bar{3}$ /Cmmm/Immm (T, C ₂) ₆	m ₂	t2=(100) t3=(100) t25=(000)	(1/2, 1/2, 1/2)	1 1 1 1*
Pm $\bar{3}$ /Im $\bar{3}$ /Immm (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(100) t5=(000) t25=(000)	(1/2, 1/2, 1/2)	1 . . 1*
				$s_{\Gamma_1^5} (r_3 \ r_5)^h \ s_{\Gamma_5^{11}} \ s_{\Gamma_3^{11}}$
Pm $\bar{3}$ /Ibca (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(001) t3=(100) t25=(000)		1 1 1 . 3*
Pm $\bar{3}$ /Cmma/Ibca (T, C ₂) ₆	m ₂	t2=(000) t3=(100) t25=(000)	(1/2, 0, 0)	1 1 1 . 1*
Pm $\bar{3}$ /Ia $\bar{3}$ /Ibca (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(001) t5=(000) t25=(000)		1 . . . 1*
Pm $\bar{3}$ /Ibca (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(010) t3=(001) t25=(000)	(1/2, 1/2, 1/2)	1 1 1 3*
Pm $\bar{3}$ /Cmma/Ibca (T, C ₂) ₆	m ₂	t2=(100) t3=(000) t25=(000)	(0, 1/2, 0)	1 1 1 1*
Pm $\bar{3}$ /Ia $\bar{3}$ /Ibca (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(010) t5=(000) t25=(000)	(1/2, 1/2, 1/2)	1 . . 1*

1	2	3	4	5
G ^(P) ≅ Fm $\bar{3}$				$s_{\Gamma_1^5} (r_3 \ r_5)^h \ s_{\Gamma_7^{10}} \ s_{\Gamma_1^{10}}$
Fm $\bar{3}$ /Pmmm (T, C ₁) ₁₂	m ₃			1 1 1 . 3*
Fm $\bar{3}$ /Cmmm/Pmmm (T, C ₂) ₆	m ₅			1 1 1 . 1*
Fm $\bar{3}$ /Pm $\bar{3}$ /Pmmm (T, C ₃) ₆	m ₃			1 . . . 1*
Fm $\bar{3}$ /Pnnn (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(100) t3=(010) t25=(000)	(1/4, 1/4, 1/4)	1 1 1 3*
Fm $\bar{3}$ /Cccm/Pnnn (T, C ₂) ₆	m ₅	t2=(010) t3=(010) t25=(000)	(3/4, 3/4, -1/4)	1 1 1 1*
Fm $\bar{3}$ /Pn $\bar{3}$ /Pnnn (T, C ₃) ₄	m ₃	t2=(100) t3=(000) t25=(000)	(1/4, 1/4, 1/4)	1 . . 1*
				$s_{\Gamma_1^5} (r_3 \ r_5)^h \ s_{\Gamma_5^{10}} \ s_{\Gamma_3^{10}}$
Fm $\bar{3}$ /Pbca (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(001) t3=(100) t25=(000)		1 1 1 . 3*
Fm $\bar{3}$ /Cmca/Pbca (T, C ₂) ₆	m ₅	t2=(000) t3=(010) t25=(000)	(-1/4, 1/4, 1/4)	1 1 1 . 1*
Fm $\bar{3}$ /Pa $\bar{3}$ /Pbca (T, C ₃) ₆	m ₃	t2=(001) t3=(000) t25=(000)		1 . . . 1*
Fm $\bar{3}$ /Pbca (T, C ₁) ₁₂	m ₃	t2=(010) t3=(001) t25=(000)		1 1 1 3*
Fm $\bar{3}$ /Cmca/Pbca (T, C ₂) ₆	m ₅	t2=(010) t3=(000) t25=(000)	(1/4, 3/4, 1/4)	1 1 1 1*
Fm $\bar{3}$ /Pa $\bar{3}$ /Pbca (T, C ₃) ₆	m ₃	t2=(010) t5=(000) t25=(000)	(-1/2, 1/2, 1/2)	1 . . 1*

Примечания: 1. В таблице символом m_i обозначены следующие матрицы:

	m_1	m_2	m_3	m_4	m_5
2	0 0 0	1 1 0	-1 1 1	1 0 1	-1 0 1
0	2 0 0	-1 1 0	1 -1 1	1 0 -1	1 0 1
0	0 0 1	0 0 1	1 1 -1	0 1 0	0 1 -1

2. Указаны лишь ненулевые векторы смещения t_0 начала координат подгрупп.

3. Векторы t_i дополнительных трансляций приведены для генераторов \hat{g} групп \hat{G} , только если хотя бы один из них отличен от нуля.

Л И Т Е Р А Т У Р А

1. Шубников А.В., Копчик В.А. Симметрия в науке и искусстве. М.: Наука, 1972.
2. Заморзаев А.М., Галарский Е.И., Палистрант А.Ф. Цветная симметрия, ее обобщения и приложения. Кишинев: Штиинца, 1978.
3. Заморзаев А.М., Карпова Ю.С., Лунгч А.П., Палистрант А.Ф. \mathcal{P} -симметрия и ее дальнейшее развитие. Кишинев: Штиинца, 1986.
4. Kotzev J.N. - MATCH (Comm.Math.Chem.), 1980, v.9, p. 41.
5. Копчик В.А., Коцев И.Н. - Сообщения ОИЯИ, 1974, P4-8067, P4-8068, Дубна.
6. Waerden B.L.Van der, Burckhardt J.J. - Z.Kristallogr., 1961, v.115, p.231.
7. Schwarzenberger R.L.E. - Bull. London Math. Soc., 1984, v.16, p.209.
8. Kotzev J.N., Litvin D.B., Birman J.L. - Physica A, 1982, v.114A, p.576.
9. Litvin D.B., Kotzev J.N., Birman J.L. - Phys. Rev. B, 1982, v. 26, p.6947.
10. Коцев И.Н., Копчик 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 И.Н., Александрова Д.А. - Сообщения ОИЯИ, 1988, P17-88-482, Дубна.
12. Холл М. Теория групп. Москва: Иностранная литература, 1962.
13. Коцев И.Н., Александрова Д.А. - В кн.: Теоретико-групповые методы в физике (Труды Международного семинара, Эрмала, 1985) (под ред. М.А.Маркова). М.: Наука, 1986, т.1, с.689.
14. Kotzev J.N., Alexandrova D.A. - Acta Cryst. A, 1988, v. A44, p.1082.
15. Kotzev J.N., Alexandrova D.A. - Lect. Not. Phys., 1988, v. 313, p.357.
16. Harker D. - Acta Cryst. A, 1981, v. A37, p.286.
17. Гуфан Ш.М. Структурные фазовые переходы. М.: Наука, 1982.
18. Kotzev J.N., Alexandrova D.A. - The Tenth European Cryst. Meeting, Wroclaw, 1986, Coll. Abstracts, p.513.
19. Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и корепределения федоровских групп. М.: Наука, 1986.

Рукопись поступила в издательский отдел
17 ноября 1989 года.

Коцев И.Н., Александрова Д.А.
Цветные пространственные группы
и их применение при анализе фазовых переходов.
Тетраэдрический класс хромоморфизма

P17-89-782

На базе теории групповых расширений получен алгоритм вывода цветных пространственных групп с цветной трансляционной подгруппой (подпрямые произведения федоровских групп G и симметрической группы S_n). Приводятся полные таблицы этих групп для классов хромоморфизма, изоморфных группе тетраэдра T , вместе с транзитивными перестановочными представлениями соответствующих пространственных групп. В таблицах содержится необходимая информация для группового анализа фазовых переходов в рамках теории Ландау.

Работа выполнена в Лаборатории теоретической физики ОИЯИ.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований. Дубна 1989

Перевод авторов

Kotzev J.N., Alexandrova D.A.
Colour Space Groups and Their Application
in the Phase Transition Analysis.
Tetrahedron Chromomorphic Classes

P17-89-782

An algorithm based on the group extension theory for deriving colour space groups with colour translation subgroups (sub-direct products of the Fedorov groups G and symmetric groups S_n) is proposed. Comprehensive tables of these groups belonging to the chromomorphic classes, isomorphic to the tetrahedron group T and corresponding transitive permutational representations are given. The necessary information for group-theoretical analysis of the phase transitions in the Landau theory is contained in the tables.

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

Communication of the Joint Institute for Nuclear Research. Dubna 1989