СООБЩЕНИЯ
ОБЪЕДИНЕННОГО
ИНСТИТУТА
ЯДЕРНЫХ
ИССЛЕДОВАНИЙ

ДУБНА



Р4 - 7514



В.А.Копцик, И.Н.Коцев, Ж-Н.М.Кужукеев

# МЕТОДЫ ЦВЕТНОЙ СИММЕТРИИ И ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУПП В МАГНИТНОЙ КРИСТАЛЛОФИЗИКЕ.

## I. МАГНИТНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ БЕЛОВСКИХ (МНОГОЦВЕТНЫХ) ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП

1973

ЛАБОРАТОРИЯ
ТЕОРЕТИЧЕСКОЙ ФИЗИКИ

P4 - 7514

В.А.Копщик, И.Н.Коцев, Ж-Н.М.Кужукеев

# МЕТОДЫ ЦВЕТНОЙ СИММЕТРИИ И ТЕОРИЯ ПРЕДСТАВЛЕНИЙ ГРУПП В МАГНИТНОЙ КРИСТАЛЛОФИЗИКЕ.

## I. МАГНИТНАЯ ИНТЕРПРЕТАЦИЯ БЕЛОВСКИХ (МНОГОЦВЕТНЫХ) ПРОСТРАНСТВЕННЫХ ГРУПП

Копцик В.А., Коцев И.Н., Кужукеев Ж-Н.М. Р4 - 7514

Методы цветной симметрии и теория представлений групп в магнитной кристаллофизике. I. Магнитная интерпретация беловских (многоцветных) пространственных групп

Дана магнитная интерпретация беловских (многоцветных) пространственных групп, позволяющая наиболее полно описать симметрию стационарных магнитных структур в кристаллах.

Сообщение Объединенного института ядерных исследований
Дубна, 1973

Koptsik V.A., Kotzev J.N., Kuzhukeev Zh.-N.M. P4 - 7514

Methods of Color Symmetry and the Theory of Representation Groups in Magnetic Crystal Physics. I. The Magnetic Interpretation of the Belov (Polychromatic) Space Groups

The magnetic interpretation of the Belov (polychromatic) space groups is presented, which allows one to give more complete description of the symmetry of the stationary magnetic structures in crystals.

Communications of the Joint Institute for Nuclear Research.
Dubna, 1973



Теоретико-групповые методы уже давно зарекомандовали себя как эффективный инструмент исследования наиболее трудных физических и математических проблем. С группами симметрии в физике связаны законы сохранения и принципы относительности физических теорий; принципы конструирования и классификации моделей исследуемых объектов; методы причинно-следственного анализа и поиска решений физических уравнений и т.д.Конкретно связь симметрии с физическими теориями осуществляется через каналы теории представлений групп.

За последние два десятилетия бурное развитие теоретико-групповых методов, стимулированное новыми открытиями, совершенно преобразило содержание классической теории симметрии и вывело ее на качественно новый уровень. Переход от групп классической симметрии к обобщенным (так называемым цветным) группам и от классических представлений групп к индуцированным, или проективным, представлениям открыл новые широкие возможности в области физических приложений теории групп.

Большой вклад в развитие теории цветной симметрии внесли Шубников, Белов, Заморзаев, Ван дер Варден и другие советские и зарубежные ученые (соответствующую библиографию можно найти в /I/). Двуцветные шубниковские группы антисимметрии широко используются как группы магнитной симметрии кристаллов /2-5/. Однако для физических приложений двуцветное обобщение кристаллофизических групп оказывается недостаточным. Предметом настоящей работы является дальнейшее развитие теории магнитной симметрии кристаллов, опирающееся на современное состояние теории цветных групп /I, 6, 7/ и на опыт применения в магнитной кристаллофизике так называемых прямых методов /4, 5, 8-I0/ и методов теории представлений групп /II-I3/.

I. Теория представлений групп применяется в феноменологическом методе Дзялошинского /II/, базирующемся на теории фазовых переходов второго рода Ландау и Лифшица /I4/. Теоретико-групповой формализм анализа магнитных фазовых переходов второго рода с помощью неприводимых представлений пространственных групп детально разработан в работе /I2/, однако его использование связано со значительными трудностями для неспециалистов в этой области. В работе Берто /I3/ подробно описан первый этап исследований по методу Дзялошинского /I4/ - построение "базисных векторов"-и предлагается система классификации магнитных структур по неприводимым представлениям федоровской группы кристаллохимической структуры, названная в /5/ "классификацией C2".

В работах /5, I0/ показано, что при построении и классификации стационарных магнитных структур методам теории представлений /II-I3/ эквивалентен так называемый "прямой метод", развитый в /4,5,9,I0/. Его сущность заключается в построении "магнитного пространственного вектора" $\vec{M}(\vec{r})$ /4/ (т.е. аксиально-векторной функции, меняющей знак при инверсии времени, определенной на системе эквивалентных точек, занимаемых магнитными атомами) исходя лишь из инвариантности $\vec{M}(\vec{r})$ относительно некоторой группы симметрии $G_M$. В зависимости от типа групп $G_M$ прямой метод в работе /5/ назывался классификацией CI ( $G_M$ -федоровская группа) и классификацией C1′ ( $G_M$ - шубниковская группа). Подробнее на этом методе остановимся в п.3, где будет показана эффективность применения в качестве $G_M$ беловских /I/ (многоцветных) пространственных групп, являющихся обобщением классических федоровских групп.

Аппарат обобщенных цветных групп $G^P$ значительно расширяет



возможности использования идей и методов теории групп симметрии, т.к. представляет (в принципе) средство учета (с помощью преобразований $P$ ) локально-негрупповых свойств материальных объектов на групповой основе $G$ ). В данной работе мы подробнее остановимся на одном возможном варианте обобщения классической симметрии - на беловских (многоцветных) пространственных группах /I/ и на их магнитной интерпретации. Первая попытка в этом направлении принадлежит Найшу /I5/. Несколько позже появились аналогичные работы /I6,I7/. С тех пор общая теория цветной симметрии существенно продвинулась вперед. В частности, были выведены и протабулированы 3- , 4- и 6-цветные беловские группы /I,7/. Предлагаемая в данной работе магнитная интерпретация беловских многоцветных групп существенно отличается от /I5-I7/.

2. Теория цветной симметрии доступно и в то же время достаточно полно изложена в монографии /I/. Напомним, что "цвет" является лишь абстрактной характеристикой некоторого дополнительного свойства, приписываемого каждой точке пространства, которое не учитывалось при определении федоровской группы симметрии кристалла $G_{крх}$. ( $G_{крх}$ - группа изометрических преобразований 3-мерного пространства, совмещающих каждую точку кристалла с эквивалентной ей точкой). Если теперь каждой точке приписать определенный "цвет" (например, учесть наличие локализованного в этой точке магнитного момента), то операциями симметрии "окрашенного" (магнитоупорядоченного) кристалла будут только некоторые операции группы $G_{крх}$, образующие подгруппу $H$ группы $G_{крх}$. Элементы группы $G_{крх}$, не входящие в $H$, переводят точки кристалла в эквивалентные по пространственному расположению, но не по "цвету" точки. Однако, если после каждой операции $g_i \in G_{крх}, g_i \notin H$ произвести соответствующую

операцию $(p_i)$ "перекрашивания" всех точек, без изменения их положения в пространстве, то новые комбинированные операции $\dot{g}_i^{(p_i)}=(p_i)\dot{g}_i$ будут операциями (цветной) симметрии для этой системы (операции $(p_i)$ обычно называют нагрузками, а $\dot{g}_i$ – носителями).

Природа операторов, используемых в качестве нагрузок, зависит от конкретной задачи. Это могут быть некоторые ортогональные преобразования, аффинные деформации, матрицы или характеры представлений, элементы группы перестановок, операция обращения времени и т.д. В частности, широко применяемые для описания симметрии магнитных кристаллов шубниковские группы /4,5/ являются двуцветными группами, нагрузки которых интерпретируются как изменение знака времени /2-5/ $(p)=(1')$ или как вигнеровский оператор обращения времени $\theta$ /I8/.

В развивавшейся до сих пор абстрактной теории цветной симметрии предполагалось, что носители действуют только на координаты точки, а нагрузки $(p_i)$ – на ее "цвет" (независимо) и поэтому коммутируют. По определению /I/ цветные группы $\dot{G}^{(p)}$ представляют замкнутые множества комбинированных элементов

$$\dot{g}_i^{(p_i)}=(p_i)\dot{g}_i=\dot{g}_i(p_i)\,, \tag{I}$$

удовлетворяющих групповым аксиомам и закону группового умножения

$$\dot{g}_i^{(p_i)}\dot{g}_j^{(p_j)}=\dot{g}_i\dot{g}_j^{(p_i p_j)}=\dot{g}_k^{(p_k)}\,,\quad \dot{g}_k^{(p_k)}\in\dot{G}^{(p)}\,, \tag{2}$$

где

$$(p_i)(p_j)=(p_i p_j)=(p_k)\in P. \tag{3}$$

Множество носителей $\dot{g}_k$ образует группу $\dot{G}$, изоморфную $(\dot{G}\leftrightarrow\dot{G}^{(p)})$ или гомоморфную $(\dot{G}\leftarrow\dot{G}^{(p)})$ цветной группе $\dot{G}^{(p)}$. Совокупность нагрузок $\{p_i\}=P$ также образует группу (но в общем случае лишь по принудительному закону факторного умножения, индуцируемому в множестве $P$ группой $\dot{G}$). Распределение нагрузок $(p_i)\in P$ по носителям $\dot{g}_i\in\dot{G}$ производится по гомоморфизмам $G\to P$ или $P\leftarrow G$.



Для физических применений удобнее несколько модифицировать определение беловских групп. Это связано с тем, что при поворотах (движениях) $g_i\in G_{kpx}$ кристалла преобразуются не только координаты атомов $\vec{r}$, но и соответствующим образом ("жестко") поворачиваются и все векторные и тензорные физические величины $A(\vec{r})$, приписываемые каждой точке $\vec{r}$ материального (геометрофизического) пространства.

Цветные нагрузки $(q_i)$ являются дополнительными локальными преобразованиями значений $A(\vec{r}_k)$ тензор-функции $A(\vec{r})$ в точках $\vec{r}_k$. Так как $A(\vec{r}_k)$ преобразуются как нагрузками $(q_i)$, так и носителями $g_i\in G_{kpx}$, операторы $g_i$ и $(q_i)$ в общем случае не коммутируют. Для определенности примем, что локальное преобразование $(q_i)$ применяется всегда после основного преобразования $g_i$ (обратное определение приводит к эквивалентным результатам), т.е.

$$g_i^{(q_i)}\equiv(q_i)g_i\,. \tag{4}$$

(В частности, полагая $g_1=1$, получаем $1^{(q)}=(q)1=(q)$). Множество комбинированных элементов $g_i^{(q_i)}$ $(g_i\in G_{kpx})$ образует цветную группу $\widetilde{G}^{(q)}=1^{(q)}G^{(q)}\to G_{kpx}$, где $G^{(q)}\leftrightarrow G_{kpx}$, с законом группового умножения

$$g_i^{(q_i)}g_k^{(q_k)}=g_e^{(q_i g_i q_k g_i^{-1})}=g_e^{(q_e)},\quad g_i g_k=g_e\in G_{kpx}\,, \tag{5}$$

однако в отличие от (3)

$$(q_e)=(q_i g_i q_k g_i^{-1})=(q_i q_s)\neq(q_i q_k)\,. \tag{6}$$

Совокупность нагрузок $(q_e)\in Q$, являясь подмножеством $Q$ некоторой группы $\widetilde{Q}$ (например, $\widetilde{Q}=\infty\infty 1'$ – полная группа трехмерных вращений, дополненная инверсией времени), может быть не обычной группой, а "группой по модулю" /I/.

Элементы $g_j^{(q_j)}\in G^{(q)}$, нагрузками которых является тождественное преобразование $(q_j)=(1)$, по своему действию на $A(\vec{r})$ не отличаются от изоморфных им $g_j \in G_{крх}$. Образуемую ими максимальную подгруппу $\{g_j^{(1)}\} \equiv H \subset G^{(q)}$ будем называть классической подгруппой беловской группы $G^{(q)}$ и отождествлять с изоморфной ей $H \subset G_{крх}$, а для упрощения записи – опускать $(q_1)=(1)$ в группах $G^{(q)}$. (Заметим, что в цветных группах $\dot{G}^{(q)}$ (I)-(3) элементы $\dot{g}_i^{(1)} \in \dot{H}^{(1)} \subset G^{(p)}$ по своему действию существенно отличаются от изоморфных им $g_i \in G_{крх}$; чтобы подчеркнуть это отличие, для них сохраним запись $\dot{g}_i^{(1)}$).

Для построения цветных групп $G^{(q)}$, изоморфных $G_{крх}$, с заданной классической подгруппой $H$ особенно удобным оказывается шубниковский метод "окрашивания" генераторов, который сводится к присоединению тех или иных нагрузок к генераторам. Известно, что любая группа может быть построена с помощью небольшого числа (для беловских групп не более шести) генераторов (порождающих элементов) и определяющих уравнений /4/, причем выбор $g \in G_{крх}$ не является однозначным. Это дает возможность в число генераторов для $G_{крх}$ включить все генераторы ее подгруппы $H$, которым приписывается нагрузка $(q_1)=(1)$. Остальным генераторам $g_e \in G_{крх}, g_e \notin H$ приписываются нагрузки $(q_e)$ таким образом, чтобы цветные генераторы $g_e^{(q_e)} \in G^{(q)}$ удовлетворяли тем же определяющим уравнениям, которым удовлетворяют изоморфные им $g_e \in G_{крх}$.

Другой эффективный метод построения цветных групп – расширением классических групп $H$ – детально описан в /I/.

В работе /7/ для вывода 3-, 4-, 6-цветных беловских групп типа $\dot{G}^{(p)}$ использовались неприводимые представления изоморфных им федоровских групп.

Следует отметить, что к полупрямому закону (5), (6) умножения комбинированных элементов (4)



$$(q_i)g_i \odot (q_j)g_j = (q_i\, g_i\, q_j\, g_i^{-1})\, g_i\, g_j \qquad (7)$$

мы пришли исходя из требования сохранения тензора-функции $A(\vec{r})$ кристалла инвариантной. К этому же закону можно прийти и иначе. Как известно, всегда определено полупрямое произведение любой группы $\tilde{Q}$ на ее группы автоморфизмов, $\tilde{Q} \odot Aut(\tilde{Q})$ (эта конструкция называется голоморфом). В качестве $Aut(\tilde{Q})$ возьмем $G_{крх}$ – любую из федоровских групп симметрии, в качестве $\tilde{Q}$ – обобщенную ортогональную группу $\infty\infty 1'$ /4/, умноженную на гомотетию К. Построим голоморф

$$\tilde{Q} \odot G_{крх} = \{q_1, q_2, \dots\} \odot \{g_1, g_2, \dots\} = \{(q_1)g_1, (q_1)g_2, \dots, (q_2)g_1, (q_2)g_2, \dots\}$$

и сделаем выборку элементов $\{(q_i)g_j\} \in \tilde{Q} \odot G_{крх}$, где $g_j \in G_{крх}$ встречаются по одному разу, а совокупность $Q$ нагрузок изоморфна некоторому подмножеству группы $\tilde{Q}$. Очевидно, $\{(q_i)g_j\} \equiv G^{(q)}$ будет группой по модулю /I/, изоморфной $G_{крх}$, с законом факторного умножения

$$(q_i)g_j \odot (q_k)g_e = \omega(g_j, g_e)\,(q_i\, g_j\, q_k\, g_j^{-1})\, g_j\, g_e. \qquad (8)$$

Действительно, пусть $g_j g_e = g_m \in G_{крх}$, а $(q_i g_j q_k g_j^{-1}) = (q_n) \in \tilde{Q}$ – элемент, не являющийся нагрузкой для $g_m$ в $G^{(q)}$. Тогда в $\tilde{Q}$ существует элемент $\omega(g_j, g_e) = q_s$ такой, что $q_s q_n = q_f$, где $(q_f)g_m = g_m^{(q_f)} \in G^{(q)}$. В частном случае, когда все факторы $\omega(g_j, g_e) = 1$, закон умножения (8) переходит в (7). Из (8) следует, что совокупность нагрузок $(q) \in Q$, входящих в $G^{(q)}$, вообще не образует группу по отношению к закону умножения, действующему в $\tilde{Q}$. Однако в совокупности $Q$ законом (8) принудительно индуцируется групповая операция, превращающая $Q$ в группу по модулю /I/. Следовательно, в общем случае теория цветных групп $G^{(q)}$ представляет теорию учета негрупповых свойств материальных объектов на групповой основе.

3. Рассмотрим, каким образом беловские цветные группы $G^{(q)}$ могут быть применены для описания симметрии магнитоупорядоченных кристаллов.

Пусть кристаллохимическая (атомная) структура магнитного кристалла описывается федоровской группой $G_{крх}$. Для простоты предположим, что все магнитные моменты атомов одинаковы по величине и локализованы в точках равновесного положения атомов, образующих одну систему эквивалентных точек, т.е.

$$\{\vec\tau_i\} = G_{крх}\vec\tau_1 = \{g_i\vec\tau_1 \mid g_i \in G_{крх}\}, \tag{9}$$

$$\vec\tau_i = g_i\vec\tau_1 = (R_i \mid \vec t_i)\vec\tau_1 = R_i\vec\tau_1 + \vec t_i, \tag{10}$$

где $R_i$ – собственные или несобственные вращения, и $\vec t_i$ – трансляции, соответствующие $g_i = (R_i \mid \vec t_i) \in G_{крх}$.

Магнитная структура описывается определенной на системе (9) аксиально-векторной функцией $\vec M(\vec\tau)$. При поворотах кристалла $g_k \in G_{крх}$ одновременно жестко поворачивается и связанное с ним векторное поле, т.е. функция $\vec M(\vec\tau)$ преобразуется в

$$g_k\vec M(\vec\tau) \equiv [g_k]\vec M(g_k^{-1}\vec\tau). \tag{11}$$

Здесь символом $g_k\vec M(\vec\tau)$ обозначено значение преобразованной функции в точке $\vec\tau$. В эту же точку, поворачиваясь на $[g_k]$, приходит вектор, начало которого до поворота было в точке $g_k^{-1}\vec\tau$ (см. /5/, /12/, а также /18,19/). В квадратных скобках выделена чисто поворотная часть $[g_k]$ федоровской операции $g_k = (R_k \mid \vec t_k)$, т.е. $[g_k] = R_k$ для собственных и $[g_k] = \bar 1 R_k$ для несобственных вращений $R_k$. (Пространственная инверсия $\bar 1$ и трансляции не изменяют направление аксиального вектора).

Классическую группу симметрии $G_M = H$ магнитной структуры образуют лишь те элементы $g_j$ из $G_{крх}$, для которых в любой точке $\vec\tau$ значения исходной $\vec M(\vec\tau)$ и преобразованных $g_j\vec M(\vec\tau)$ функций совпадают, т.е.



$$g_j\vec M(\vec\tau) \equiv [g_j]\vec M(g_j^{-1}\vec\tau) = \vec M(\vec\tau), \quad g_j \in G_M = H \subset G_{крх}. \tag{12}$$

Отсюда следует, что магнитные моменты в точках $\vec\tau_j = g_j\vec\tau_1$, $g_j \in H \subset G_{крх}$ могут быть получены из одного момента $\vec M(\vec\tau_1)$:

$$\vec M(\vec\tau_j) = \vec M(g_j\vec\tau_1) = [g_j]\vec M(\vec\tau_1), \quad g_j \in H. \tag{13}$$

Однако $H\vec\tau_1 = \{g_j\vec\tau_1 \mid g_j \in H \subset G_{крх}\} \subseteq G_{крх}\vec\tau_1$, т.е. с помощью группы $G_M = H \subset G_{крх}$ и $\vec M(\vec\tau_1)$ можно построить лишь некоторую магнитную подструктуру кристалла. Для полного описания магнитной структуры, кроме $G_M = H$, необходимо задать $G_{крх}$ и $s' \le s$ моментов $\vec M(\vec\tau_1), \vec M(\vec\tau_2), \dots, \vec M(\vec\tau_{s'})$, где $s$ – индекс подгруппы $H$ в $G_{крх}$, а $\{\vec\tau_2, \vec\tau_3, \dots, \vec\tau_{s'}\} \notin H\vec\tau_1$, но $\{\vec\tau_1, \vec\tau_2, \dots, \vec\tau_{s'}\} \in G_{крх}\vec\tau_1$.

Итак, для классификации магнитных структур кристаллов в рамках классических (федоровских) групп необходимо составить так называемый CI-классификационный символ /5/

$$\{G_{крх}; G_{M_1}, \vec M(\vec\tau_1^1), \vec M(\vec\tau_2^1), \dots, \vec M(\vec\tau_{s_1'}^1); \dots; G_{M_i}, \vec M(\vec\tau_1^i), \vec M(\vec\tau_2^i), \dots, \vec M(\vec\tau_{s_i'}^i); \dots\}, \tag{14}$$

где индекс $i$ отличает группы симметрии $G_{M_i}$ и координаты $\vec\tau_x^i$ атомов $i$-го сорта в сложных магнитных кристаллах.

Системы классификации CI и CI$'$ ($G_M$ – федоровские и шубниковские группы соответственно) /5/ являются примерами применения "прямого" метода. Однако используемые в CI и CI$'$ группы $G_M$ не дают возможности исчерпывающим образом описать симметрию магнитного кристалла. Во-первых, в рамках федоровских и шубниковских групп симметрия кристалла с учетом магнитной структуры обычно значительно ниже симметрии атомного упорядочения $G_{крх}$, в то время как гамильтониан /13/ или термодинамический потенциал /11/ системы, а также ряд других физических величин инвариантны относительно $G_{крх}$. Во-вторых, в символе (14) магнитные моменты $\vec M(\vec\tau_1), \dots, \vec M(\vec\tau_{s'})$ не связаны элементами группы симметрии $G_M$, хотя на самом деле симметрия кристалла накладывает определенные ограничения на их взаимную ориентацию. Иногда в CI-символ (I4) дополнительно вводятся некоторые уравнения, частично учитывающие связь между моментами $\vec{M}(\vec{\tau}_1),\dots,\vec{M}(\vec{\tau}_{s'})$. Более того, для спиральных структур вообще невозможно записать символ (I4) без введения в него дополнительных уравнений (из-за $s'\to\infty$) /5/. Вышеупомянутые проблемы решаются применением в качестве $G_M$ беловских групп $G^{(q)}$ /20/.

Определим сначала действие цветных операторов $g_k^{(q_k)}$ на функцию $\vec{M}(\vec{\tau})$. Как обычно, символом $g_k^{(q_k)}\vec{M}(\vec{\tau})$ обозначим значение преобразованной функции в точке $\vec{\tau}$. Операторы $g_k$, осуществляя поворот всего векторного поля, преобразуют функцию $\vec{M}(\vec{\tau})$ в $g_k\vec{M}(\vec{\tau})$ (II), в то время как нагрузки $(q_k)$, интерпретируемые как локальные преобразования, действуют лишь на значения $g_k\vec{M}(\vec{\tau})$ в точке $\vec{\tau}$. Комбинированное преобразование запишется в виде

$$g_k^{(q_k)}\vec{M}(\vec{\tau}) \equiv (q_k)\,g_k\vec{M}(\vec{\tau}) \equiv (q_k)[g_k]\,\vec{M}(g_k^{-1}\vec{\tau}) \,. \tag{I5}$$

Нетрудно убедиться, что образуемая операторами $g_k^{(q_k)}$ (I5) цветная группа действительно является беловской группой типа $G^{(q)}$ (4-6). К функции $\vec{M}(\vec{\tau})$ применим сначала оператор $g_k^{(q_k)}$ (I5), а потом $g_i^{(q_i)}$ (о порядке действия операторов см. /I8/, стр. I29, или /I9/, стр. 42).

$$\begin{aligned} g_i^{(q_i)} g_k^{(q_k)}\vec{M}(\vec{\tau}) &\equiv \left(g_i^{(q_i)}\left(g_k^{(q_k)}\vec{M}\right)\right)(\vec{\tau}) = \\ &= (q_i)[g_i]\left(g_k^{(q_k)}\vec{M}\right)(g_i^{-1}\vec{\tau}) = \\ &= (q_i)[g_i](q_k)[g_k]\,\vec{M}(g_k^{-1}g_i^{-1}\vec{\tau}) = \\ &= (q_i)[g_i](q_k)[g_i^{-1}g_i g_k]\,\vec{M}((g_i g_k)^{-1}\vec{\tau}) = \\ &= (q_i)[g_i](q_k)[g_i^{-1}][g_\ell]\,M(g_\ell^{-1}\vec{\tau}) = \\ &= (q_i\, g_i\, q_k\, g_i^{-1})\,g_\ell\vec{M}(\vec{\tau}) \equiv g_\ell^{(q_\ell)}\vec{M}(\vec{\tau})\,, \end{aligned} \tag{I6}$$



где учтены равенства $g_i g_k = g_\ell$, $[g_k] = [g_i^{-1}g_\ell]$, определения (II) и (I5), а также (4)-(6).

Если $G_M = G^{(q)}$, т.е. $G^{(q)} = \{g_k^{(q_k)}\}$ является группой симметрии для функции $\vec{M}(\vec{\tau})$, то

$$g_k^{(q_k)}\vec{M}(\vec{\tau}) = \vec{M}(\vec{\tau}), \qquad g_k^{(q_k)} \in G^{(q)} = G_M\,. \tag{I7}$$

Из определения (I5) и из $g_k^{(q_k)}\in G_M$ (I7) следует, что магнитный момент $\vec{M}(\vec{\tau}_k)$ в любой точке $\vec{\tau}=\vec{\tau}_k=g_k\vec{\tau}_1$ (I0) определяется равенством

$$\vec{M}(\vec{\tau}_k) = \vec{M}(g_k\vec{\tau}_1) = (q_k)[g_k]\,\vec{M}(\vec{\tau}_1)\,, \qquad g_k^{(q_k)}\in G^{(q)}\,. \tag{I8}$$

С другой стороны, т.к. нагрузки $(q_k)$, являясь локальными преобразованиями моментов $\vec{M}(\vec{\tau}_i)$ в точках $\vec{\tau}_i$, не действуют на координаты атомов, т.е. $g_k^{(q_k)}\vec{\tau} = \vec{\tau}$, можно записать

$$G_M\,\vec{\tau}_1 = G^{(q)}\vec{\tau}_1 = \{g_k^{(q_k)}\vec{\tau}_1\} = \{g_k\vec{\tau}_1\} = G_{\kappa p x}\,\vec{\tau}_1\,. \tag{I9}$$

Другими словами, если в группе цветной симметрии магнитной структуры $G_M = G^{(q)}$ "стереть" /3/ все нагрузки (считать их тождественными преобразованиями), то получим группу симметрии кристаллохимической структуры $G_{\kappa p x}$.

Следовательно, равенство (I8) в случае $G^{(q)} = G_M$ позволяет построить полную магнитную структуру кристалла исходя лишь из одного (любого) момента $M(\vec{\tau}_1)$. Соответствующий классификационный символ будет /20/

$$\{G^{(q)};\ \vec{M}(\vec{\tau}_1)\}\,. \tag{20}$$

Если в кристалле имеется несколько сортов неэквивалентных магнитных атомов, в (20) добавляется по одному $\vec{M}(\vec{\tau}_1^{\,i})$ для каждого ($i$ -го) сорта.

Очевидно, классификация (20) магнитных структур с помощью беловских групп /20/ значительно проще и полнее классификаций CI и CI' /5/.

Существенным преимуществом предлагаемой в данной работе магнитной интерпретации цветной симметрии по сравнению с другими возможными /I5/–I7/ является наличие классической подгруппы $H \subset G^{(q)}$, совпадающей с применяемыми до сих пор в физике пространственными группами симметрии. Это открывает возможность использования всей даваемой классической симметрией информации о физических свойствах кристаллов, дополняя ее следствиями учета "скрытой симметрии" ("криптосимметрии"). Все физические свойства кристалла, которые запрещаются классической подгруппой $H \subset G^{(q)}$, запрещаются и беловской группой $G^{(q)}$. Однако некоторые допускаемые подгруппой Н свойства могут оказаться запрещенными для кристалла с беловской группой симметрии $G^{(q)} \supset H$. Например, если $H$ не является одной из 44 федоровских ферромагнитных групп /4/, сразу можно сделать выводы о невозможности ферромагнетизма или слабого ферромагнетизма в данной структуре и о том, что внешнее магнитное поле приводит к изменению симметрии структуры. Аналогичные выводы можно сделать о невозможности пьезомагнетизма, магнитоэлектрического эффекта и т.д. Наличие классической подгруппы $H \subset G^{(q)}$ значительно облегчает определение неприводимых представлений, по которым преобразуются компоненты найденной с помощью беловской группы $G^{(q)}$ магнитной структуры, т.е. применение методов теории представлений для построения входящих в термодинамический потенциал инвариантов и последующего применения метода Дзялошинского. (Функции, инвариантные относительно данной подгруппы $H \subset G_{кpx}$, могут преобразоваться только по тем представлениям группы $G_{кpx}$, чьи ограничения на подгруппу содержат единичное представление подгруппы $H$ ).

Отметим, наконец, что шубниковские группы /4/ полностью



включаются в беловские двуцветные группы, не исчерпывая их. Чтобы убедиться в этом, разложим двуцветную беловскую группу $G^{(2)}$ по классической подгруппе $H$ индекса 2

$$G^{(2)} = H + g_2^{(q_2)} H .$$

Если $(q_2)=(1')$, то $G^{(2)}$ совпадает с шубниковской группой $Ш = H + g_2' H$. Однако, если $(q_2) \neq (1')$, то и $G^{(2)} \neq Ш$. Магнитные конфигурации, описываемые $G^{(2)} = Ш$ и $G^{(2)} \neq Ш$, могут существенно различаться. Пусть, например, $g_2 = (\bar{1}|\vec{0}) = \bar{1}$ (пространственная инверсия) и входит в группу симметрии узла $\vec{r}_1$, занимаемого магнитным атомом. Тогда группа $G^{(2)} \neq Ш$ с $(q_2)=(2_x) \equiv R(\vec{x},\pi)$ допускает в этом узле $\vec{M}(\vec{r}_1) = (M_x,0,0)$, группа $G^{(2)} \neq Ш$ с $(q_2)=(2_x')=(1'2_x)$ допускает лишь $\vec{M}(\vec{r}_1)=(0,M_y,M_z)$, а если $(q_2)=1'$, $G^{(2)} = Ш$, то $\vec{M}(\vec{r}_1) \equiv 0$.

В заключение отметим, что возможна и другая магнитная интерпретация цветной симметрии, основанная на $\dot{G}^{(p)}$ группах (I–3). В отличие от классических операций симметрии $g_k \in G_{кpx}$ (II) носители $\dot{g}_k \in \dot{G} \leftrightarrow G_{кpк}$ действуют на $\vec{M}(\vec{r})$ следующим образом:

$$\dot{g}_k \vec{M}(\vec{r}) \equiv \vec{M}(g_k^{-1} \vec{r}) . \quad (21)$$

Соответственно отличным от (I5) будет и определение действия $\dot{g}_k^{(p_k)} \in \dot{G}^{(p)}$ на $\vec{M}(\vec{r})$ :

$$\dot{g}_k^{(p_k)} \vec{M}(\vec{r}) \equiv (p_k) \vec{M}(g_k^{-1} \vec{r}), \quad \dot{g}_k^{(p_k)} \in \dot{G}^{(p)}. \quad (22)$$

Частным случаем магнитной интерпретации $\dot{G}^{(p)}$ -групп, в котором нагрузки ( $p_k$ ) берутся только из группы $\infty\infty 1'$, являются рассматривавшиеся в /I5–I7/ группы симметрии спиновых структур. Однако описать все экспериментально обнаруженные магнитные конфигурации группами /I5–I7/ невозможно. (Например, для $|\vec{M}(\vec{r})| \neq const$ ). Другие недостатки $\dot{G}^{(p)}$ – интерпретации обсуждались в /20/.

Предлагаемая в данной работе $G^{(q)}$– магнитная интерпретация беловских групп позволяет в полной мере использовать все преимущества методов цветной симметрии.

## Литература


1. А.В.Шубников, В.А.Копцик. Симметрия в науке и искусстве, "Наука", М., 1972.
2. Б.А.Тавгер, В.М.Зайцев. ЖЭТФ, 30, 564 (1956).
3. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Электродинамика сплошных сред, ГИТТЛ, М., 1957.
4. В.А.Копцик. Шубниковские группы, Изд. МГУ, М., 1966.
5. W.Opechowski, T.Dreyfus. Acta Cryst., A 27, 470 (1971).
6. А.М.Заморзаев. Кристаллография, 12, 811 (1967); 14, 195 (1969).
7. В.А.Копцик, Ж.Н.М.Кужукеев. Кристаллография, 17, 705 (1972).
8. Е.А.Туров. Физические свойства магнитоупорядоченных кристаллов, изд. АН СССР, М., 1962.
9. Ю.И.Сиротин, В.А.Копцик. ДАН СССР, 151, 328 (1963).
10. Е.З.Говорова, В.А.Копцик. Сб. "Физика и химия твердого тела", с. 22, ФХИ им. Карпова, М., 1973.
11. И.Е.Дзялошинский. ЖЭТФ, 32, 1547 (1954); 46, 1420 (1964).
12. О.В.Ковалев. ФТТ, 5, 3156 (1963).
13. E.F.Bertaut. J.Phys., Suppl., 32, C1-462 (1971).
14. Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц. Статистическая физика, "Наука", М., 1964.
15. В.Е.Найш. Изв. АН СССР, с.физ., 27, 1496 (1963).
16. A.Kitz. Phys. stat. sol., 10, 455 (1965).
17. W.F.Brinkman, R.J.Elliott. Proc.Roy.Soc., A 294, 343 (1966).
18. Е.Вигнер. Теория групп, ИЛ, М., 1961.
19. Г.Я.Любарский. Теория групп и её применений в физике, Физматгиз, М., 1958.
20. В.А.Копцик, И.Н.Коцев, Ж.Н.М.Кужукеев. Тезисы Международной конференции по магнетизму. Москва, 1973.



Рукопись поступила в издательский отдел
22 октября 1973 года.