

<https://doi.org/10.15407/dopovidi2021.02.038>

УДК 535.3; 530.1:512.54

Л.А. Булавін, В.О. Губанов, А.П. Науменко

Київський національний університет ім. Тараса Шевченка

E-mail: anaumenko2015@gmail.com

Класи проективних представлень у визначенні симетрії колективних спінових збуджень та їхньої дисперсії в кристалах і періодичних наноструктурах

Представлено академіком НАН України Л.А. Булавіним

Розглянуто розподіл електронних елементарних збуджень у кристалах і періодичних наноструктурах за незвідними проективними представленнями відповідних проективних класів точкових і просторових груп симетрії та залежність проективних класів від структури нетривіальних трансляцій просторових груп. Головну увагу приділено встановленню двозначних незвідних проективних представлень і відповідних їм проективних класів з урахуванням спіну електрона, коли хвильовими функціями електронних станів є двозначні спінові орбіталі. Описано методики побудови фактор-систем, проективно еквівалентних (p -еквівалентних) фактор-систем, притаманних певному проективному класу проективних представлень, та методики зведення їх до p -еквівалентного стандартного вигляду. Запропоновано нову класифікацію проективних класів для гексагональних структур, а також побудовано коректну таблицю симетрійних перетворень спінових. Показано, що встановлення проективних класів проективних представлень і їх змін для різних точок зон Бріллюена в кристалічному графіті γ -C і двоперіодичній структурі одношарового графену C_{L1} дає можливість надати якісну симетрійну інтерпретацію дисперсії електронних збуджень у кристалічному графіті і одношаровому графені. Зокрема, це дає змогу виявити спінзалежні розщеплення електронних станів у їх зонах Бріллюена, які обумовлені спін-орбітальною взаємодією в спінових орбіталах.

Ключові слова: *спінові представлення груп симетрії, проективні класи, фактор-системи, дисперсія елементарних збуджень.*

Дослідження енергетичних спектрів електронних колективних збуджень і їхньої дисперсії в кристалах та дво- й одноперіодичних наноструктурах завжди були в центрі уваги наукової спільноти. Проте в літературі практично відсутні методи побудови фактор-систем, що визначають проективні класи і відповідні їм таблиці незвідних проективних представлень. Особливо недостатньо обґрунтовані методики побудови двозначних спінових, або спінових, електронних орбіталей, симетрія яких визначається двозначними проективними

Цитування: Булавін Л.А., Губанов В.О., Науменко А.П. Класи проективних представлень у визначенні симетрії колективних спінових збуджень та їхньої дисперсії в кристалах і періодичних наноструктурах. *Допов. Нац. акад. наук Укр.* 2021. № 2. С. 38–50. <https://doi.org/10.15407/dopovidi2021.02.038>

представленнями груп симетрії з врахуванням спіну електрона, і методи інтерпретації спин-залежних розщеплень в електронних енергетичних спектрах молекул, кристалів і періодичних наноструктур.

У цій роботі розглянуто методики побудови фактор-систем, що характеризують певний проєктивний клас, та їх зведення до стандартного вигляду, запропоновано нову класифікацію проєктивних класів для гексагональних структур, а також побудовано коректну таблицю симетрійних перетворень хвильових функцій квантових станів з напівцілим спіном — співорів. Виконано симетрійний аналіз дисперсії коливальних та елементарних збуджень без врахування спіну електрона та з його врахуванням для π -зон кристалів графіту і наведено їх кореляції з електронними π -зонами одношарового графену.

1. Опис системи H -поворотів групи $6/mmm (D_{6h})$, кристалічні структури графіту і графену та їх зони Бріллюена і базисні елементи симетрії. На рис. 1 зображено призму позначення H -поворотів групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$. Зміст H -поворотів пояснюється на рис. 1, а їх опис наведено в [1]. Як і в [1], інверсійним поворотам надано перевагу перед дзеркальними поворотами.

На рис. 2, *a* зображено стандартну елементарну комірку кристалічної ґратки графіту Бернала, γ - C [2], на рис. 2, *b* показано розташування та орієнтацію елементів точкової групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$, на рис. 2, *в* — зону Бріллюена кристалів графіту γ - C та її точки симетрії, які позначені літерами, що відповідають позначенням Херрінга для гексагональних структур [3, 4], а на рис. 3 — елементарну комірку Вігнера—Зейтца (*a*) та зону Бріллюена (*б*) одношарового графену C_{L1} .

На рис. 3, *a* суцільними лініями схематично зображено елементарну комірку графену C_{L1} , його вектори основних трансляцій \vec{a}_1 і \vec{a}_2 та вказано використану в розрахунках орієнтацію її елементів у тривимірному просторі, а штриховими — відповідну орієнтацію векторів оберненої ґратки \vec{b}_1 і \vec{b}_2 у довільному масштабі та положення вузлів оберненої ґратки в оберненому просторі. На рис. 3, *б*, навпаки, суцільними лініями зображено вектори оберненої ґратки, а штриховими — вектори прямої ґратки. Елементарні комірки (комірки Вігнера—Зейтца) графенового шару в реальному просторі (рис. 3, *a*) та в оберненому просторі (рис. 3, *б*), де така комірка збігається з першою зоною Бріллюена, виділені сірим фоном. Цікаво, що ці комірки повернуті одна відносно іншої на кут $\pi/2$ (або на кут 30° , оскільки поворот на кут 60° в обох випадках є елементом симетрії). На рис. 3, *б* також позначені точки високої симетрії зони Бріллюена графену — точки K і M . Еквівалентні точки позначені одним або двома штрихами.

Просторова група симетрії кристалічної ґратки графіту $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$ є несиморфною і визначається базисними (головними) елементами, які можна вибрати у вигляді: $h_1 = (0|e)$, $h_2 = (0|c_3)$, $h_3 = (0|c_3^2)$, $h_4 = (0|(u_2)_1)$, $h_5 = (0|(u_2)_2)$, $h_6 = (0|(u_2)_3)$, $h_7 = (\frac{a}{2}|c_2)$,

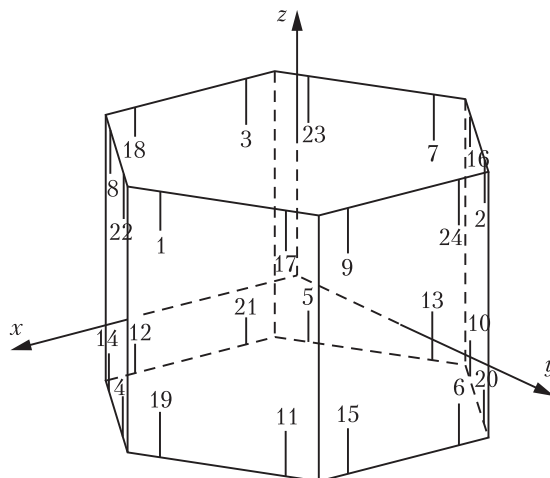


Рис. 1. Призма H -поворотів точкової групи $6/mmm (D_{6h})$

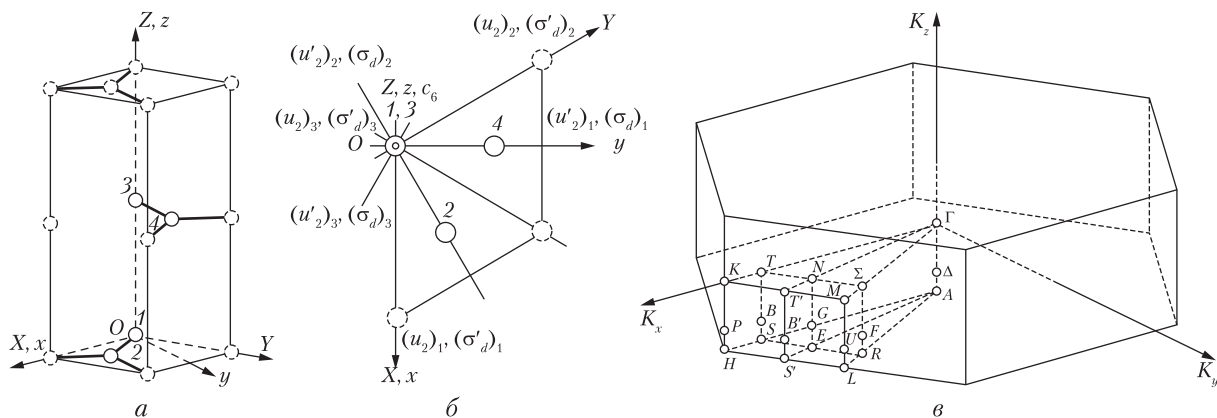
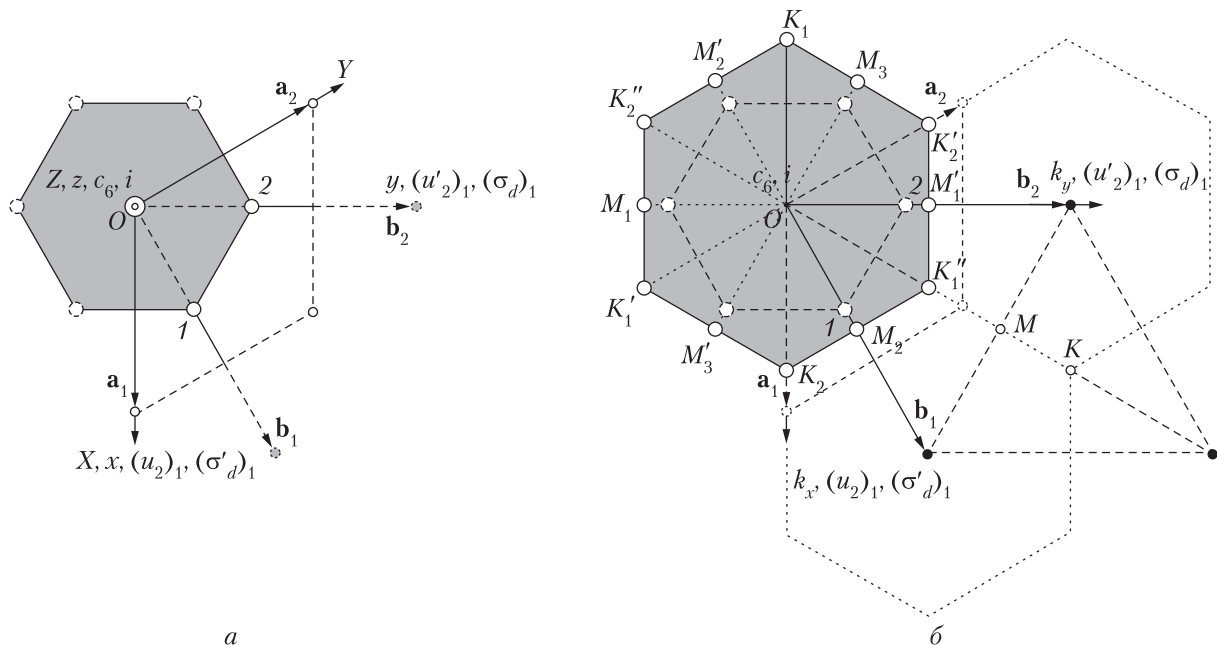


Рис. 2. Структура стандартної елементарної комірки кристала графіту γ -C (а); розташування та орієнтація елементів точкової групи симетрії $6/mmm$ (D_{6h}) (б); зона Бріллюена кристалів графіту γ -C та її точки симетрії (в). Кружечками вказані положення атомів вуглецю



де

$$\omega'(r_2, r_1) = \frac{\omega(r_2, r_1)u(r_2 r_1)}{u(r_1)u(r_2)}. \quad (5)$$

Усі фактор-системи, зв'язані співвідношеннями (5), називають проєктивно-еквівалентними або p -еквівалентними. Сукупність всіх p -еквівалентних фактор-систем називають класом фактор-систем. Це також стосується і відповідних їм проєктивних представлень.

Група $6/mmm$ має вісім класів проєктивних представлень. Вони класифікуються за допомогою системи з трьох коефіцієнтів α , β і γ , які набувають значень 1 і -1 . Кожний з коефіцієнтів визначається співвідношенням $[\omega(r_j, r_i)]^{-1}\omega(r_i, r_j) = \frac{\omega(r_i, r_j)}{\omega(r_j, r_i)}$ для відповідної пари комутуючих елементів r_i і r_j із твірних елементів групи або елементів, що належать різним класам, які містять твірні елементи.

У ролі таких комутуючих елементів для групи $6/mmm$ зручно вибрати, наприклад, такі твірні елементи: $a = r_1 = (u_2)_1$, $b = r_2 = c_2$ і $c = r_3 = i$. При цьому

$$\alpha = \frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)} = \frac{\omega[(u_2)_1, c_2]}{\omega[c_2, (u_2)_1]}, \quad \beta = \frac{\omega(a, c)}{\omega(c, a)} = \frac{\omega[(u_2)_1, i]}{\omega[i, (u_2)_1]}, \quad \gamma = \frac{\omega(b, c)}{\omega(c, b)} = \frac{\omega(c_2, i)}{\omega(i, c_2)}.$$

Для класифікації і позначення класів фактор-систем і, відповідно, класів проєктивних представлень у групі $6/mmm$ зручно вибрати таку (істотно відмінну від запропонованої в [6] як визначеннями коефіцієнтів, так і їх значеннями) систему:

- клас K_0 — $\alpha = 1$, $\beta = 1$, $\gamma = 1$,
- клас K_1 — $\alpha = -1$, $\beta = 1$, $\gamma = 1$,
- клас K_2 — $\alpha = 1$, $\beta = -1$, $\gamma = 1$,
- клас K_3 — $\alpha = -1$, $\beta = -1$, $\gamma = 1$,
- клас K_4 — $\alpha = 1$, $\beta = 1$, $\gamma = -1$,
- клас K_5 — $\alpha = -1$, $\beta = 1$, $\gamma = -1$,
- клас K_6 — $\alpha = 1$, $\beta = -1$, $\gamma = -1$,
- клас K_7 — $\alpha = -1$, $\beta = -1$, $\gamma = -1$.

Незвідні представлення групи хвильового вектора $D_{\vec{k}}$ містять нескінченну кількість членів $D_{\vec{k}}(h)$ для елементів $h \in G_{\vec{k}}$. Кожний елемент h можна зобразити у вигляді $h = (\vec{\alpha} + \vec{a}|r)$, де r — “поворотний” елемент, сукупність яких утворює групу $F_{\vec{k}}$, $\vec{\alpha}$ — вектор нетривіальної трансляції на частину періоду ґратки Браве, \vec{a} — вектор тривіальної трансляції.

Значення матриць $D_{\vec{k}}(h)$ і їх характеристик $\chi_{D_{\vec{k}}(h)}$ знаходяться за формулами

$$D_{\vec{k}}(h) = e^{-i\vec{k}(\vec{\alpha} + \vec{a})} \omega(r) D(r) \quad (6)$$

і

$$\chi_{D_{\vec{k}}(h)} = e^{-i\vec{k}(\vec{\alpha} + \vec{a})} \omega(r) \chi_{D(r)}, \quad (7)$$

де для представлень, що описують стани без урахування спіну (з цілим спіном), $w(r) = u(r) \equiv u_{1,\bar{k}}(r)$ – функція, яка приводить фактор-систему $\omega(r_2, r_1) \equiv \omega_{1,\bar{k}}(r_2, r_1)$, що визначається властивостями просторової групи кристала, до стандартного вигляду $\omega'(r_2, r_1) \equiv \omega'_{1,\bar{k}}(r_2, r_1)$; для представлень, що описують стани з урахуванням спіну (з напівцілим спіном), $w(r) = u_s(r) \equiv u_{1,\bar{k}}(r)u_2(r)$ – функція, яка приводить фактор-систему $\omega(r_2, r_1) = \omega_s(r_2, r_1) = \omega_{1,\bar{k}}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1)$, що визначається перетворенням співорів у просторовій групі, до стандартного вигляду $\omega'(r_2, r_1) = \omega'_s(r_2, r_1) = \omega'_{1,\bar{k}}(r_2, r_1)\omega'_2(r_2, r_1)$, $u_2(r)$ – функція, яка приводить фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$, що визначається перетвореннями співорів при операціях симетрії груп напрямків груп хвильових векторів $F_{\bar{k}}$, до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1)$; $D(r)$ – незвідні представлення, що відповідають стандартним фактор-системам того проєктивного класу, до якого належить фактор-система $\omega(r_2, r_1)$; $\chi_{D(r)}$ – характери незвідних проєктивних представлень $D(r)$.

Побудова фактор-системи $\omega_1(r_2, r_1) \equiv \omega_{1,\bar{k}}(r_2, r_1)$ проводиться за формулою [6]

$$\omega_{1,\bar{k}}(r_2, r_1) = e^{i(\bar{k}-r_2^{-1}\bar{k})\bar{\alpha}_1} \quad (8)$$

і для кожної з точок зони Бріллюена не становить труднощів.

Фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ визначається умовою

$$\omega_2(r_2, r_1) = \begin{cases} 1 & \text{при } 0 \leq \vartheta < 2\pi, \\ -1 & \text{при } 2\pi \leq \vartheta < 4\pi, \end{cases}$$

де ϑ – кут повороту для обертання, що відповідає добутку елементів $r_2 r_1$. Проєктивний клас, до якого вона належить, також легко встановити [6].

Дамо означення стандартної фактор-системи для проєктивних представлень проєктивного класу K_j .

Стандартними фактор-системами для проєктивних представлень різних проєктивних класів K_j некомутативних (неабелевих) точкових груп симетрії порядку h називатимемо фактор-системи $\omega'(r_2, r_1)$, які складаються з дійсних коефіцієнтів 1 та -1 і містять максимальне число періодів за елементами r_2 , що утворюють суміжні класи, які формують фактор-групи за відповідними інваріантними підгрупами.

Стандартні фактор-системи проєктивного класу K_0 повністю складаються з коефіцієнтів, рівних 1, і незвідні проєктивні представлення цього класу збігаються із звичайними однозначними незвідними векторними представленнями груп симетрії. Для двозначних незвідних проєктивних представлень проєктивного класу K_1 також легко розрахувати матриці незвідних проєктивних представлень за перетвореннями кутового моменту з напівцілим квантовим числом j , наприклад з числом $j = 1/2$, і задача побудови представлень класу K_1 точкових і просторових груп симетрії, зокрема, електронних спінових представлень з врахуванням спіну електрона зводиться до задачі побудови фактор-систем $\omega_2(r_2, r_1)$, встановлення вигляду стандартних фактор-систем проєктивного класу K_1 і знаходження функцій $u_2(r)$, які приводять фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ до p -еквівалентного стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1)$.

3. Методика побудови фактор-систем $\omega_2(r_2, r_1)$, що описують перетворення співорів під дією операцій симетрії, та їх зведення до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1)$. Перш за все

побудуємо принципово важливу фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$, яка належить проєктивному класу K_1 і описує перетворення спінових змінних для групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$.

У ролі твірних елементів групи $6/mmm$ виберемо елементи

$$a = c_3, b = (u_2)_1, c = c_2 \text{ і } d = i. \quad (10)$$

При такому виборі твірних елементів враховується принцип композиції, відповідно до якого група $6/mmm$ може бути представлена як прямий добуток груп 622 і $\bar{1}$ ($6/mmm = 622 \times \bar{1}$), далі, група 622 – як прямий добуток груп 32 і 2 ($622 = 32 \times 2$), а група 32 – як прямий добуток груп 3 і $2'$ ($32 = 3 \times 2'$).

Скориставшись визначальними співвідношеннями, яким задовольняють вибрані твірні елементи, обчислимо всі значення $\omega_2(r_2, r_1)$. Суттєво, що при цьому за визначальні співвідношення повинні бути взяті визначальні співвідношення для подвійної групи $(6/mmm)'$:

$$\begin{aligned} a^6 &= e, b^4 = e, c^4 = e, d^2 = e, \\ ab &= qba^2, ac = ca, ad = da, \\ bc &= qcb, bd = db, cd = dc. \end{aligned} \quad (11)$$

З метою встановлення алгебраїчних виразів для елементів подвійної групи $(6/mmm)'$ через її твірні елементи скористаємося загальним для елементів нескінченної подвійної групи обертань K' співвідношенням [6, 7]

$$f^{-1}c_{\bar{l}}(\alpha)f = c_{f^{-1}\bar{l}}(\alpha), \quad (12)$$

де $c_{\bar{l}}(\alpha)$ – поворот на кут α навколо осі \bar{l} , а f – довільне обертання в подвійній групі обертань з трактуванням одиничної операції як повороту на кут 4π . Саме це співвідношення дає змогу одержати вказані вище переставні визначальні співвідношення і алгебраїчні вирази для елементів подвійної групи через елементи, що її створюють [7]. Наприклад, для визначення елемента подвійної групи $(u_2)_2$ одержимо $c_3(u_2)_1qc_3^2 = (u_2)_2$, що приводить до виразу:

$$(u_2)_2 = qaba^2 = qqba^2a^2 = ba^4 = qba. \quad (13)$$

Відзначимо, що можна скористатись іншим вибором твірних елементів, але це приведе до зміни для них і визначальних співвідношень. У разі твірних елементів (11), як легко бачити, для елементів подвійної групи $(6/mmm)'$ одержимо такі їх алгебраїчні вирази: $e = d^0c^0b^0a^0$, $c_3 = d^0c^0b^0a^1$, $c_3^2 = d^0c^0b^0a^2$, $(u_2)_1 = d^0c^0b^1a^0$, $(u_2)_2 = qd^0c^0b^1a^1$, $(u_2)_3 = d^0c^0b^1a^2$, $c_2 = d^0c^1b^0a^0$, $c_6^5 = d^0c^1b^0a^1$, $c_6 = qd^0c^1b^0a^2$, $(u'_2)_1 = d^0c^1b^1a^0$, $(u'_2)_2 = qd^0c^1b^1a^1$, $(u'_2)_3 = d^0c^1b^1a^2$, $i = d^1c^0b^0a^0$, $ic_3 = d^1c^0b^0a^1$, $ic_3^2 = d^1c^0b^0a^2$, $(\sigma_d)_1 = d^1c^0b^1a^0$, $(\sigma_d)_2 = qd^1c^0b^1a^1$, $(\sigma_d)_3 = d^1c^0b^1a^2$, $\sigma_h = d^1c^1b^0a^0$, $ic_6^5 = d^1c^1b^0a^1$, $ic_6 = qd^1c^1b^0a^2$, $(\sigma'_d)_1 = d^1c^1b^1a^0$, $(\sigma'_d)_2 = qd^1c^1b^1a^1$ та $(\sigma'_d)_3 = d^1c^1b^1a^2$.

Розрахована у такий спосіб для групи $6/mmm$ фактор-система наведена в табл. 1. Ця фактор-система належить проєктивному класу K_1 , оскільки для неї $\alpha = -1$, $\beta = 1$ і $\gamma = 1$. Нижніми індексами біля значень коефіцієнтів фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ в табл. 1, що містять цифри в круглих дужках, представлено таблицю множення елементів групи

Таблиця 1. Фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ для групи $6/mmm$ (D_{6h}). У нижній частині таблиці наведені значення функції $u_2(r)$ що приводять фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_1(r_2, r_1)$ для групи $6/mmm$

$\omega_2(r_2, r_1)$	r_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
r_2	e	c_3	c_5^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
1	e	1(1)	1(2)	1(3)	1(4)	1(5)	1(6)	1(7)	1(8)	1(9)	1(10)	1(11)	1(12)	1(13)	1(14)	1(15)	1(16)	1(17)	1(18)	1(19)	1(20)	1(21)	1(22)	1(23)	1(24)
2	c_3	1(2)	1(3)	-1(1)	-1(6)	-1(4)	-1(5)	1(8)	-1(9)	1(7)	-1(12)	-1(10)	-1(11)	-1(14)	-1(15)	-1(13)	-1(18)	-1(17)	-1(16)	1(20)	-1(21)	-1(19)	-1(24)	-1(22)	-1(23)
3	c_5^2	1(3)	-1(1)	-1(2)	1(5)	1(6)	1(4)	-1(9)	-1(7)	1(8)	1(11)	1(12)	1(10)	1(15)	-1(13)	-1(14)	1(17)	1(18)	1(16)	-1(21)	-1(19)	1(20)	1(23)	1(24)	1(22)
4	$(u_2)_1$	1(4)	-1(5)	1(6)	-1(1)	1(2)	-1(3)	-1(10)	1(11)	1(12)	1(7)	-1(8)	-1(9)	1(16)	-1(17)	1(18)	-1(13)	1(14)	-1(15)	-1(22)	1(23)	1(24)	1(19)	-1(20)	-1(21)
5	$(u_2)_2$	1(5)	-1(6)	1(4)	-1(3)	-1(1)	1(2)	-1(11)	1(12)	1(10)	-1(9)	1(7)	-1(8)	1(17)	-1(18)	1(16)	-1(15)	-1(13)	1(14)	-1(23)	1(24)	1(22)	-1(21)	1(19)	-1(20)
6	$(u_2)_3$	1(6)	-1(4)	1(5)	1(2)	-1(3)	-1(1)	-1(12)	1(10)	1(11)	-1(8)	-1(9)	1(7)	1(18)	-1(16)	1(17)	1(14)	-1(15)	-1(13)	-1(24)	1(22)	1(23)	-1(20)	-1(21)	1(19)
7	c_2	1(7)	1(8)	-1(9)	1(10)	1(11)	1(12)	-1(1)	-1(2)	1(3)	-1(4)	-1(5)	-1(6)	1(19)	1(20)	-1(21)	1(22)	1(23)	1(24)	-1(13)	-1(14)	-1(15)	-1(16)	-1(17)	-1(18)
8	c_6^5	1(8)	-1(9)	-1(7)	-1(12)	-1(10)	-1(11)	-1(2)	-1(3)	-1(1)	1(6)	1(4)	1(5)	1(20)	-1(21)	-1(19)	-1(24)	-1(22)	-1(23)	-1(14)	-1(15)	-1(13)	1(18)	1(16)	1(17)
9	c_6	1(9)	1(7)	1(8)	-1(11)	-1(12)	-1(10)	1(3)	-1(1)	1(2)	1(5)	1(6)	1(4)	1(21)	1(19)	1(20)	-1(23)	-1(24)	-1(22)	1(15)	-1(13)	1(14)	1(17)	1(18)	1(16)
10	$(u_2)_1$	1(10)	-1(11)	1(12)	-1(7)	1(8)	1(9)	1(4)	-1(5)	-1(6)	-1(1)	1(2)	-1(3)	1(22)	-1(23)	1(24)	-1(19)	1(20)	1(21)	1(16)	-1(17)	-1(18)	-1(13)	-1(14)	-1(15)
11	$(u_2)_2$	1(11)	-1(12)	1(10)	1(9)	-1(7)	1(8)	1(5)	-1(6)	-1(4)	-1(3)	-1(1)	1(2)	1(23)	-1(24)	1(22)	1(21)	-1(19)	1(20)	1(17)	-1(18)	-1(16)	-1(15)	-1(13)	1(14)
12	$(u_2)_3$	1(12)	-1(10)	1(11)	1(8)	1(9)	-1(7)	1(6)	-1(4)	-1(5)	1(2)	-1(3)	-1(1)	1(24)	-1(22)	1(23)	1(20)	1(21)	-1(19)	1(18)	-1(16)	-1(17)	1(14)	-1(15)	-1(13)
13	i	1(13)	1(14)	1(15)	1(16)	1(17)	1(18)	1(19)	1(20)	1(21)	1(22)	1(23)	1(24)	1(1)	1(2)	1(3)	1(4)	1(5)	1(6)	1(7)	1(8)	1(9)	1(10)	1(11)	1(12)
14	ic_3	1(14)	1(15)	-1(13)	-1(18)	-1(16)	-1(17)	1(20)	-1(21)	1(19)	-1(24)	-1(22)	-1(23)	1(2)	1(3)	-1(1)	-1(6)	-1(4)	-1(5)	1(8)	-1(9)	1(7)	-1(12)	-1(10)	-1(11)
15	ic_5^2	1(15)	-1(13)	-1(14)	1(17)	1(18)	1(16)	-1(21)	-1(19)	1(20)	1(23)	1(24)	1(22)	1(3)	-1(1)	-1(2)	1(5)	1(6)	1(4)	-1(9)	-1(7)	1(8)	1(11)	1(12)	1(10)
16	$i(u_2)_1$	1(16)	-1(17)	1(18)	-1(13)	1(14)	-1(15)	-1(22)	1(23)	1(24)	1(19)	-1(20)	-1(21)	1(4)	-1(5)	1(6)	-1(1)	1(2)	-1(3)	-1(10)	1(11)	1(12)	1(7)	-1(8)	-1(9)
17	$i(u_2)_2$	1(17)	-1(18)	1(16)	-1(15)	-1(13)	1(14)	-1(23)	1(24)	1(22)	1(19)	-1(20)	1(1)	1(5)	-1(6)	1(4)	-1(3)	-1(1)	1(2)	-1(11)	1(12)	1(10)	-1(9)	1(7)	-1(8)
18	$i(u_2)_3$	1(18)	-1(16)	1(17)	1(14)	-1(15)	-1(13)	-1(24)	1(22)	1(23)	-1(20)	-1(21)	1(19)	1(6)	-1(4)	1(5)	1(2)	-1(3)	-1(1)	-1(12)	1(10)	1(11)	-1(8)	-1(9)	1(7)
19	ic_2	1(19)	1(20)	-1(21)	1(22)	1(23)	1(24)	-1(13)	-1(14)	1(15)	-1(16)	-1(17)	-1(18)	1(7)	1(8)	-1(9)	1(10)	1(11)	1(12)	-1(1)	-1(2)	1(3)	-1(4)	-1(5)	-1(6)
20	ic_6^5	1(20)	-1(21)	-1(19)	-1(24)	-1(22)	-1(23)	-1(14)	-1(15)	-1(13)	1(18)	1(16)	1(17)	1(8)	-1(9)	-1(7)	-1(12)	-1(10)	-1(11)	-1(2)	-1(3)	-1(1)	1(6)	1(4)	1(5)
21	ic_6	1(21)	1(19)	1(20)	-1(23)	-1(24)	-1(22)	1(15)	-1(13)	1(14)	1(17)	1(18)	1(16)	1(9)	1(7)	1(8)	-1(11)	-1(12)	-1(10)	1(3)	-1(1)	1(2)	1(5)	1(6)	1(4)
22	$i(u_2)_1$	1(22)	-1(23)	1(24)	-1(19)	1(20)	1(21)	1(16)	-1(17)	-1(18)	-1(13)	1(14)	-1(15)	1(10)	-1(11)	1(12)	-1(7)	1(8)	1(9)	1(4)	-1(5)	-1(6)	-1(1)	1(2)	-1(3)
23	$i(u_2)_2$	1(23)	-1(24)	1(22)	1(21)	-1(19)	1(20)	1(17)	-1(18)	-1(16)	-1(15)	-1(13)	1(14)	1(11)	-1(12)	1(10)	1(9)	-1(7)	1(8)	1(5)	-1(6)	-1(4)	-1(3)	-1(1)	1(2)
24	$i(u_2)_3$	1(24)	-1(22)	1(23)	1(20)	1(21)	-1(19)	1(18)	-1(16)	-1(17)	1(14)	-1(15)	-1(13)	1(12)	-1(10)	1(11)	1(8)	1(9)	-1(7)	1(6)	-1(4)	-1(5)	1(2)	-1(3)	-1(1)
$u_2(r)$		1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1

$6/mmm$ (числами у дужках вказані цифрові позначення елементів, які відповідають добуткам $r_2 r_1$).

Слід зазначити, що О.В. Ковальовим [8, 9] була здійснена спроба побудувати цю фактор-систему у вигляді таблиці множення спінорів у групі $6/mmm$. Проте цю спробу можна визнати невдалою, оскільки з 576 значень таблиці, одержаної в [8, 9], протилежний знак мають 216 значень [1].

Знаючи вигляд стандартної фактор-системи $\omega'_2(r_2, r_1)$ класу K_1 , ми здатні побудувати стандартні фактор-системи, а отже, і незвідні проєктивні представлення для всіх проєктивних класів [1].

Оскільки фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ і $\omega'_2(r_2, r_1)$ для групи симетрії $6/mmm$ належать проєктивному класу K_1 , то для цієї групи стандартна фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$ збігається зі стандартною фактор-системою $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ [$\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$], де в символі стандартної фактор-системи цифрою в його нижньому індексі в круглих дужках позначений її проєктивний клас. Стандартний вигляд фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$, що позначається $\omega'_2(r_2, r_1)$ [$\omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$], наведений у табл. 2. У табл. 2 використана додаткова розбивка елементів симетрії групи $6/mmm$ на блоки a, b, c і d по горизонталі та блоки $a(a_1, a_2)$, $b(b_1, b_2)$, $c(c_1, c_2)$ і $d(d_1, d_2)$ по вертикалі. Ця розбивка дає змогу використовувати компактну форму запису фактор-систем, у якій коефіцієнти, що мають однакові значення, в кожному з блоків замінюються одним значенням одного коефіцієнта, однаковим для всіх коефіцієнтів блока. В табл. 2 суцільними лініями виділені контури таких блоків для коефіцієнтів, що мають значення -1 .

У табл. 3 наведені стандартні фактор-системи всіх восьми проєктивних класів групи $6/mmm (D_{6h})$. Їх неважко побудувати, знайшовши фактор-систему точки A зони Бріллюена кристалічного графіту $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ за формулою (8) і звівши її до стандартного вигляду $\omega'_{1,A}(r_2, r_1)$. Як виявилось, ця фактор-система належить проєктивному класу K_5 , незвідні проєктивні представлення якого з урахуванням спіну електрона переходять у дво-значні проєктивні представлення проєктивного класу K_4 [1].

У табл. 4 наведені характери двозначних незвідних проєктивних представлень проєктивного класу K_1 групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$, які відповідають спінорній фактор-системі $\omega_2(r_2, r_1)$ цього класу (а), і незвідних проєктивних представлень, що відповідають стандартній фактор-системі проєктивного класу K_1 цієї групи симетрії $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ (б) [1].

4. Симетрія електронних π -зон і їхня дисперсія для одношарового графену C_{L1} і кристалічного графіту γ -С. Спінзалежні розщеплення електронних станів з урахуванням спіну електрона. У [10] за допомогою побудови фактор-систем для різних точок зон Бріллюена для збуджень електронних π -зон у кристалічному графіті γ -С і одношаровому графені C_{L1} , зведення їх до стандартного вигляду з встановленням відповідних їм проєктивних класів проєктивних представлень наведені методики якісного симетрійного розрахунку їх дисперсії і виявлення спінзалежних розщеплень їх електронних станів. Такі спінзалежні розщеплення електронних π -зон відбуваються в точках K одношарового графену C_{L1} і вздовж лінії $K-P-H$ у зоні Бріллюена кристалічного графіту γ -С [10].

На рис. 4, а зображено криві дисперсії в зонах Бріллюена станів електронних π -зон у кристалічному графіті γ -С з урахуванням спіну електрона. На рис. 4, б наведено криві дисперсії π -зон у напрямку $K-P-H$ зони Бріллюена без урахування спіну і з його

Таблиця 3. Нова класифікація проєктивних класів групи $6/mmm (D_{6h})$ та їх стандартні фактор-системи:
 1 – клас K_0 , 2 – клас K_1 , 3 – клас K_2 , 4 – клас K_3 , 5 – клас K_4 , 6 – клас K_5 , 7 – клас K_6 , 8 – клас K_7

$K_0 (\alpha = 1, \beta = 1, \gamma = 1)$				$K_1 (\alpha = -1, \beta = 1, \gamma = 1)$				$K_2 (\alpha = 1, \beta = -1, \gamma = 1)$				$K_3 (\alpha = -1, \beta = -1, \gamma = 1)$			
$\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(2)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(3)}(r_2, r_1)$			
a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a
b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c
d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d
1	2	3	4	5	6	7	8	1	2	3	4	5	6	7	8

$K_4 (\alpha = 1, \beta = 1, \gamma = -1)$				$K_5 (\alpha = -1, \beta = 1, \gamma = -1)$				$K_6 (\alpha = 1, \beta = -1, \gamma = -1)$				$K_7 (\alpha = -1, \beta = -1, \gamma = -1)$			
$\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(5)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(6)}(r_2, r_1)$				$\omega'_{(7)}(r_2, r_1)$			
a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a	a
b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b	b
c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c	c
d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d	d
5	6	7	8	1	2	3	4	5	6	7	8	1	2	3	4

Таблиця 4. Характери двозначних незвідних проєктивних представлень проєктивного класу K_1 групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$, які відповідають спіновій фактор-системі $\omega_2(r_2, r_1)$ цього класу (а), і незвідних проєктивних представлень, що відповідають стандартній фактор-системі проєктивного класу K_1 цієї групи симетрії $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ (б)

Проєктивний клас	Позначення незвідного проєктивного представлення	$6/mmm(D_{6h})$															
		e	c_3	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u_2'$	i	ic_3	ic_3^2	$3\sigma_d$	σ_h	ic_6^5	ic_6	$3\sigma_d'$
а																	
K_1	$\Gamma_7^+ (E_1^+)$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_7^- (E_1^-)$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_8^+ (E_2^+)$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_8^- (E_2^-)$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_9^+ (E_3^+)$	2	-2	2	0	0	0	0	0	2	-2	2	0	0	0	0	0
	$\Gamma_9^- (E_3^-)$	2	-2	2	0	0	0	0	0	-2	2	-2	0	0	0	0	0
б																	
K_1	$(P_1^{(1)})^+$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
	$(P_1^{(1)})^-$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0	-2	1	1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
	$(P_2^{(1)})^+$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
	$(P_2^{(1)})^-$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0	-2	1	1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
	$(P_3^{(1)})^+$	2	2	2	0	0	0	0	0	2	2	2	0	0	0	0	0
	$(P_3^{(1)})^-$	2	2	2	0	0	0	0	0	-2	-2	-2	0	0	0	0	0

врахуванням. У точці K одношарового графену C_{L1} , де в малому околі точок Дірака все-таки відбувається невелике спінзалежне розщеплення електронних π -зон, величина якого становить $\sim 1,0-1,5$ меВ, внаслідок дуже малої енергії спін-орбітальної взаємодії для атомів C , яка за оцінками [11] також $\sim 1,0-1,5$ меВ.

ЦИТОВАНА ЛІТЕРАТУРА

1. Губанов В.О., Науменко Ф.П., Білий М.М., Доценко І.С., Навозенко О.М., Сабов М.М., Булавін Л.А. Кореляція енергетичних спектрів коливальних і електронних збуджень та їхня дисперсія в графіті та графені. *Укр. фіз. журн.* 2018. **63**, № 5. С. 431–454. <https://doi.org/10.15407/ujpe63.5.431>
2. Bernal J.D. The structure of graphite. *Proc. Roy. Soc. London. A.* 1924. **106**, № 740. P. 749–773. <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0101>
3. Herring C. Effect on time-reversal symmetry on energy bands of crystals. *Rhys. Rev.* 1937. **52**, № 4. P. 361–365. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.361>
4. Herring C. Accidental degeneracy in the energy bands of crystals. *Rhys. Rev.* 1937. **52**, № 4. P. 365–373. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.365>
5. Wood E.A. The 80 diperiodic groups in three dimensions. *Bell System Techn. J.* 1964. **43**, № 1. P. 541–559. <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1964.tb04077.x>
6. Бир Г.Л., Пикус Г.Е. Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках. Москва: Наука, 1972. 584 с.
7. Gubanov V.O., Ovander L.N. Development of the bethe method for the construction of two-valued space group representations and point groups. *Ukr. J. Phys.* 2015. **60**, № 9. P. 950–959. <https://doi.org/10.15407/ujpe60.09.0950>
8. Ковалев О.В. Неприводимые представления пространственных групп. Киев: Изд-во АН УССР, 1961. 154 с.
9. Ковалев О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Справочное руководство. Москва: Наука, 1986. 367 с.
10. Gubanov V.O., Naumenko A.P., Dotsenko I.S., Sabov M.M., Gryn D.V., Bulavin L.A. Fine spin-dependent splitting of electronic excitations and their dispersion in singlelayer graphene and graphite. *Ukr. J. Phys.* 2020. **65**, № 4. P. 619–625. <https://doi.org/10.15407/ujpe65.7.625>

11. Katsnelson M.I. Graphene: carbon in two dimensions. Cambridge: Cambridge Univ. Press, 2012. 351 p.

Надійшло до редакції 12.03.2021

REFERENCES

1. Gubanov, V.O., Naumenko, A.P., Bilyi, M.M., Dotsenko, I.S., Navozenko, O.M., Sabov, M.M. & Bulavin, L.A. (2018). Energy spectra correlation of vibrational and electronic excitations and their dispersion in graphite and graphene. Ukr. J. Phys., 63, No. 5, pp. 431-454. <https://doi.org/10.15407/ujpe63.5.431>
2. Bernal, J.D. (1924). The structure of graphite. Proc. Roy. Soc. London. A. 106, No. 740, pp. 749-773. <https://doi.org/10.1098/rspa.1924.0101>
3. Herring, C. (1937). Effect on time-reversal symmetry on energy bands of crystals. Rhys. Rev., 52, No. 4, pp. 361-365. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.361>
4. Herring, C. (1937). Accidental degeneracy in the energy bands of crystals. Rhys. Rev., 52, No. 4, pp. 365-373. <https://doi.org/10.1103/PhysRev.52.365>
5. Wood, E.A. (1964). The 80 di-periodic groups in three dimensions. Bell System Techn. J., 43, No. 1, pp. 541-559. <https://doi.org/10.1002/j.1538-7305.1964.tb04077.x>
6. Bir, G.L. & Pikus, G.E. (1974). Symmetry and strain-induced effects in semiconductors. New York: Wiley.
7. Gubanov, V.O. & Ovander, L.N. (2015). Development of the Bethe method for the construction of two-valued space group representations and point groups. Ukr. J. Phys., 60, No. 9, pp. 950-959. <https://doi.org/10.15407/ujpe60.09.0950>
8. Kovalev, O.V. (1965). Irreducible representations of the space groups. New York: Gordon and Breach Sci. Publ. Inc.
9. Kovalev, O.V. (1986). Irreducible and induced representations and co-representations of Fedorov groups. Moscow: Nauka (in Russian).
10. Gubanov, V.O., Naumenko, A.P., Dotsenko, I.S., Sabov, M.M., Gryn, D.V. & Bulavin, L.A. (2020). Fine spin-dependent splitting of electronic excitations and their dispersion in single-layer graphene and graphite. Ukr. J. Phys., 65, No. 4, pp. 619-625. <https://doi.org/10.15407/ujpe65.7.625>
11. Katsnelson, M.I. (2012). Graphene: carbon in two dimensions. Cambridge: Cambridge Univ. Press.

Received 12.03.2021

L.A. Bulavin, V.O. Gubanov, A.P. Naumenko

Taras Shevchenko National University of Kyiv

E-mail: anaumenko2015@gmail.com

CLASSES OF PROJECTIVE REPRESENTATIONS IN DETERMINING THE SYMMETRY OF COLLECTIVE SPINOR EXCITATIONS AND THEIR DISPERSION IN CRYSTALS AND PERIODIC NANOSTRUCTURES

The distribution of electronic elementary excitations in crystals and periodic nanostructures according to irreducible projective representations of the corresponding projective classes of point and spatial symmetry groups and the dependence of projective classes on the structure of nontrivial translations of spatial groups are considered. The main attention is paid to the establishment of two-valued irreducible projective representations and corresponding projective classes taking into account the electron spin, when the wave functions of electronic states are two-valued spinor orbitals. This paper presents methods for constructing factor systems that are projectively equivalent (p -equivalent) factor systems, inherent in a certain projective class of projective representations, and methods for reducing them to the p -equivalent standard form. A new classification of projective classes for hexagonal structures is proposed, and a correct table of symmetric transformations of spinors is constructed. It is shown that the establishment of projective classes of projective representations and their changes for different points of Brillouin zones in crystalline graphite γ -C and two-period structure of single-layer graphene C_{L1} makes it possible to provide qualitative symmetric interpretation of electron excitation dispersion in crystalline graphite and single-layer graphene. In particular, it makes it possible to detect spin-dependent cleavages of electronic states in their Brillouin zones, which are due to the spin-orbit interaction in spinor orbitals.

Keywords: *spinor representations of symmetry groups, projective classes, factor systems, dispersion of elementary excitations.*