

UNIVERZITET U BEOGRADU

Fizički fakultet

Božidar Nikolić

Vibronska (ne)stabilnost diperiodičnih sistema

Magistarski rad

Beograd, 2000. godine

Rad je rađen na Fizičkom fakultetu Univerziteta u Beogradu, na katedri za Kvantnu i matematičku fiziku, pod rukovodstvom prof. dr Milana Damnjanovića.

Koristim priliku da se zahvalim na nesebičnoj pomoći doc. dr Zoranu Radoviću, dr Čedomiru Petroviću na vrlo aktuelnim podacima, kao i prof. dr Milanu Damnjanoviću na velikoj podršci i bezgraničnom strpljenju.

Sadržaj

Uvod	4
1 Simetrije diperiodičnih sistema	6
1.1 Diperiodične grupe	6
1.1.1 Kristalni sistemi i kristalne klase	6
1.1.2 Faktorizacija diperiodičnih grupa	9
1.2 Rerezentacije diperiodičnih grupa	10
2 Dinamika rešetke	14
2.1 Normalne mode kristala	14
2.1.1 Harmonijski potencijal	14
2.1.2 Primena simetrije	16
2.1.3 Normalne mode kod kristala	19
2.2 Klasifikacija normalnih moda diperiodičnih sistema	21
2.2.1 Modifikovani grupni projektori — osnovne ideje	21
3 Jahn-Teller-ov efekat	23
3.1 Klasična teorija	23
4 Rezultati	25
4.1 Klasifikacija normalnih moda diperiodičnih sistema	25
4.2 Jahn-Teller-ov efekat u diperiodičnim sistemima	25
4.3 Ostali rezultati	26
4.4 Narušenje Jahn-Teller-ovog teorema	26
4.4.1 Primer 1 – Dg16	26
4.4.2 Primer 2 – Dg18	27
4.4.3 Primer 3 – Suštinsko narušenje teorema	27
4.4.4 Simetrija bakar-oksidge ravni	28
4.4.5 Sistemi sa teškim fermionima	30
4.4.6 Grafitna ravan	30
5 Zaključak	34
A Oznake diperiodičnih grupa	35
B Orbite diperiodičnih grupa	37
B.1 Orbite	37
B.2 Tabela	38

C Detalji računa	51
C.1 Centrirane rešetke	51
C.2 Razlaganje simetrizovanih kvadrata reprezentacija – alternativni metod	52
C.3 Specijalne tačke simetrizovanih kvadrata	54
C.4 Razlaganje simetrizovanih kvadrata dekompleksifikovanih reprezentacija	54
D Rezultati — tabele	56
D.1 Klasifikacija normalnih moda i razlaganje simetrizovanih kvadrata	56

Uvod

U ovom radu je ispitana vibronska (ne)stabilnost diperioidičnih sistema. Diperioidični sistemi su trodimenzionalni sistemi koji imaju samo dva translaciono periooidična pravca. Diperioidični sistemi su razni slojeviti kristali, zatim superrešetke raznih materijala kod kojih se različiti slojevi ne ponavljaju periooidično, normalno na slojeve. Diperioidične grupe su grupe simetrije diperioidičnih sistema. Diperioidične grupe su poznate u matematici još od tridesetih godina ovog veka, od radova nemačkih matematičara *Herman-a*, *Weber-a*, *Aleksander-a* i *Hermman-a*, koji su diperioidične grupe dobili generalizacijom simetrija ornamenata i traka. Ipak, ove grupe dugo nisu bile interesantne za fizičare. Početak interesovanja fizičara za diperioidične grupe se poklapa sa poluprovodničkom revolucijom tokom pedesetih godina. Tada se pojavio vrlo bitan rad *Elizabeth Wood* [1] u kome su tabelirane sve diperioidične grupe, dobijene kao podgrupe prostornih grupa, i date su orbite za sve grupe. *Elizabeth Wood* je bila motivisana činjenicom da su diperioidične grupe upravo grupe simetrija tankih poluprovodnih slojeva, a primena postojećih prostornih grupa na takve sisteme je bila neadekvatna. Međutim, simetrija nije u potpunosti iskorišćena tom prilikom. Ponovni interes za diperioidične grupe se javio krajem osamdesetih godina i, naravno, ponovo je bio motivisan otkrićima u fizici. Naime, otkrićem visokotemperaturske superprovodnosti, a posebno otkrićem strukture visokotemperaturskih materijala, ustanovljeno je da su ovi materijali upravo diperioidični i da je sam efekat superprovodnosti vezan za provodnu bakar-oksidnu ravan. Primena postojećih prostornih grupa je takođe bila neprikladna, a potpun matematički aparat za diperioidične grupe nije bio razvijen. Upravo je ova praznina u teoriji, kao i izuzetna atraktivnost sistema, bila glavni motiv grupe sa katedre za Kvantnu i matematičku fiziku Fizičkog fakulteta da se upusti, za početak, u razvoj matematičkog aparata za diperioidične grupe. U tom cilju prvo je pokazano da je svaka diperioidična grupa faktorizabilna, što je bio prvi korak za nalaženje ireducibilnih reprezentacija [2]. Poznavanje ireducibilnih reprezentacija omogućava potpuno korišćenje simetrije u rešavanju raznolikih fizičkih problema.

Prvi problem koji se nameće i u kome je potrebno iskoristiti simetriju sistema, odnosno ireducibilne reprezentacije grupa simetrije, je klasifikacija normalnih moda i ispitivanje *Jahn-Teller*-ovog teorema. Ovaj rad je posvećen upravo rešenju ovog problema za diperioidične sisteme.

U prvom poglavlju su dati opšti podaci o diperioidičnim grupama: kristalne klase, tipovi rešetki, osnovni podaci o faktorizaciji diperioidičnih grupa, osnovni podaci o ireducibilnim reprezentacijama diperioidičnih grupa.

U drugom i trećem poglavlju su izložene osnove teorije klasifikacije normalnih moda, korišćenja simetrije za klasifikaciju normalnih moda, kao i osnove teorije *Jahn-Teller*-ovog efekta, u okviru adijabatske aproksimacije.

U četvrtom poglavlju je dat pregled rezultata, i konstatovano odsustvo *Jahn-Teller*-ovog efekta za pojedine tetragonalne i heksagonalne diperioidične sisteme, što, ujedno, predstavlja

glavni rezultat ovog rada.

U dodacima su date tabele međunarodnih oznaka za diperioidične grupe (dodatak 1), tabela sa orbitama diperioidičnih grupa (dodatak 2), detalji računa, kao na primer: pojam centriranih rešetki, alternativni metod razlaganja simetrizovanih kvadrata, specijalne tačke simetrizovanih kvadrata (dodatak 3). U poslednjem dodatku su date tabele sa razlaganjima dinamičke reprezentacije i razlaganjima simetrizovanih kvadrata, što je bio i osnovni cilj ovoga rada.

Glava 1

Simetrije diperiodičnih sistema

Kao što je rečeno u uvodu *diperiodične grupe* su grupe simetrije diperiodičnih sistema. Diperiodični sistemi su *trodimenzionalni* sistemi periodični duž dva pravca. Postoji 80 diperiodičnih grupa koje su prvi put sistematski tabelirane u radu [1]. Po sugestiji Međunarodnog kristalografskog udruženja (IOC), [3], ove grupe se nazivaju i *grupe simetrija slojeva* (*Layer groups*). U ovom radu će biti zadržan naziv koji je dat u radu *Elizabeth Wood* [1], zbog toga što on potpuno definiše sisteme koji imaju diperiodičnu simetriju.

1.1 Diperiodične grupe

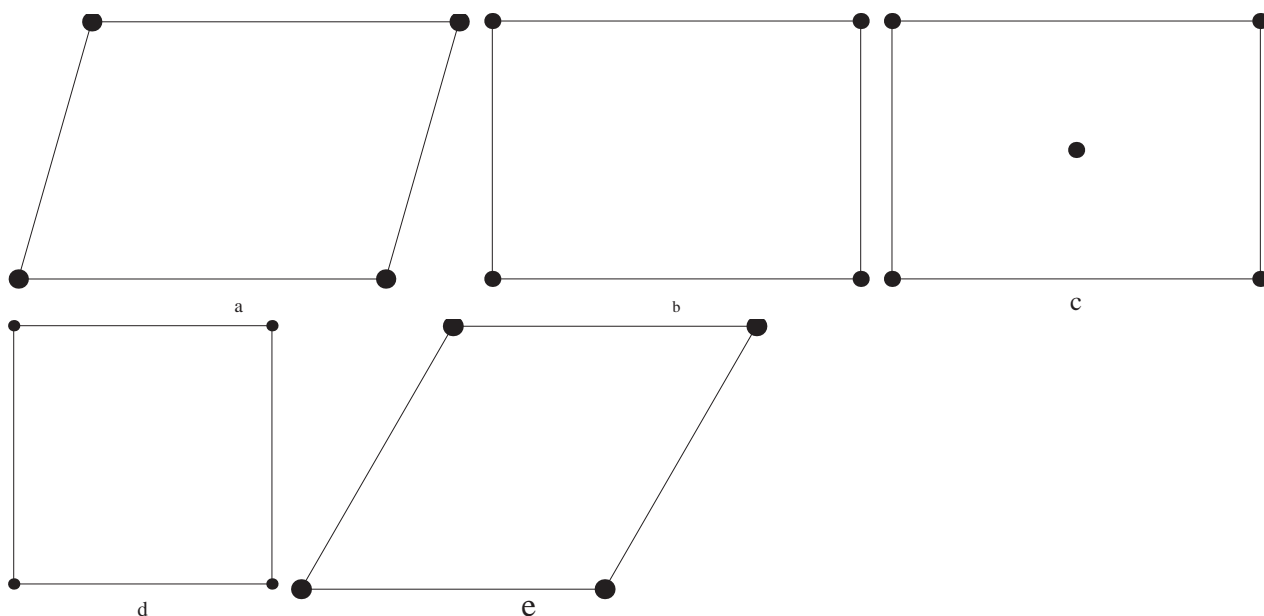
1.1.1 Kristalni sistemi i kristalne klase

Translaciona grupa diperiodičnih sistema je, kao i kod prostornih i linijskih grupa, diskretna *Abelova* grupa, generisana, u ovom slučaju, sa dva linearno nezavisna vektora iz \mathbb{R}^2 . Ti vektori \mathbf{a}_1 i \mathbf{a}_2 , određuju translacije koje generišu beskonačne ciklične grupe $T_i = \{ (I | z_i \mathbf{a}_i) \mid z_i \in \mathbf{Z} \}$, pa je $\mathbf{T} = T_1 \otimes T_2$. Svaki element grupe \mathbf{T} se stoga može izraziti kao $(I | \mathbf{z}) = (I | z_1 \mathbf{a}_1 + z_2 \mathbf{a}_2)$, tj. određen je parom celih brojeva (z_1, z_2) .

Delovanjem grupe \mathbf{T} na neku tačku u \mathbb{R}^2 dobija se skup periodično raspoređenih tačaka u \mathbb{R}^2 . Ta orbita se naziva rešetka sa periodima \mathbf{a}_i . Paralelelogram sa stranicama \mathbf{a}_i naziva se elementarnom ćelijom rešetke. Rešetke diperiodičnih grupa su, očigledno, dvodimenzionalne, te je zbog toga i *Brillouin*-ova zona ovakvih sistema dvodimenzionalna, mada treba imati na umu sve vreme da su diperiodične grupe simetrije trodimenzionalnih sistema.

Slično prostornim grupama, podgrupa ortogonalne grupe, $\mathbf{O}(3)$, koja ostavlja neku rešetku invarijantnom mora biti konačna aksijalna tačkasta grupa, i naziva se holodrija. Periodičnost rešetke ograničava skup holodrija. Naime, ako rotacija za ugao ϕ , oko ose koja je ortogonalna na rešetku, ostavlja invarijantnom rešetku, u bazu perioda mora biti reprezentovana celobrojnom matricom, pa je i njen trag, $1 + 2 \cos(\phi)$, celobrojan. Oдавde sledi da ugao rotacije može biti samo oblika $\frac{2\pi}{n}$ za $n = 1, 2, 3, 4, 6$. Pored toga, za razliku od prostornih grupa, elementi holodrije moraju da ostavljaju i ravan rešetke invarijantnom. Zbog toga su u slučaju diperiodičnih grupa holodrije aksijalne tačkaste grupe (holodrije prostornih grupa su tačkaste grupe), koje samim tim ostavljaju invarijantnom i osu ortogonalnu na ravan rešetke. Takođe je očigledno da element holodrije, zbog dvodimenzionalnosti rešetke, mora biti i ravan refleksije koja sadrži rešetku, kao i inverziju u ravni, odnosno rotaciju za ugao π oko vertikalne ose. Postoje četiri aksijalne tačkaste grupe koje zadovoljavaju sve navedene uslove, samim tim kod diperiodičnih sistema postoje četiri holodrije: \mathbf{C}_{2h} – monoklični sistemi (7 grupa),

D_{2h} – ortorombični sistemi (41 grupa), D_{4h} – tetragonalni sistemi (16 grupa) i D_{6h} – heksagonalni sistemi (16 grupa). Usled dvodimenzionalnosti rešetke diperiodične grupe imaju, strogo gledano, tačno četiri tipa *Bravais*-ovih rešetki. Međutim zbog istorijskih razloga, odnosno zbog toga što su prvi put diperiodične grupe nađene kao podgrupe prostornih grupa, u literaturi postoji pet tipova *Bravais*-ovih rešetki. Dodatni tip je centrirana ortorombična rešetka, koja se u konstruktivnom načinu dobijanja 1.1.2 diperiodičnih grupa ne dobija. Drugim rečima pojam centrirane rešetke je nasleđen iz teorije prostornih grupa. Može se pokazati da je svaka centrirana rešetka ekvivalentna nekoj rombičnoj rešetki sa jednakim translacionim periodima C.1. U ovom radu su, ipak, korišćene centrirane rešetke, samo zbog toga da bi dobijeni rezultati mogli lako da se uporede sa postojećim, kao i da se ne bi unosila dodatna zabuna u ionako prilično nesistematsku kristalografiju subperiodičnih sistema (monoperiodični i diperiodični sistemi) ¹.



Slika 1.1: Tipovi rešetki diperiodičnih grupa: (a) iskošena rešetka, (b) pravougaona, (c) pravougaona – centrirana, (d) kvadratna i (e) heksagonalna.

Grupe simetrije rešetke su, kao i kod prostornih grupa, grupe koje su semidirektan proizvod translacija, \mathbf{T} , i holodrije, P_H , $Dg_H = \mathbf{T} \wedge P_H$.

Međutim, ovim se ne iscrpljuju moguće grupe simetrije pravih, diperiodičnih, kristala. Kod njih se, pored geometrijskog rasporeda, mora računati i sa simetrijama fizičkih svojstava atoma u tačkama rešetke; dalje, kod kristala atomi (joni, molekuli) nisu raspoređeni samo u tačkama rešetke, već translaciona invarijantnost dozvoljava da različiti (ili jednaki) atomi u kristalu formiraju više međusobno transliranih, ali jednakih, *Bravais*-ovih rešetki. Tako se pojedini atomi nalaze u unutrašnjosti elementarne ćelije. Ukupna simetrija ovakvog kristala očigledno sadrži sve translacije rešetke, ali je njena ortogonalna podgrupa manja od

¹Istini za volju Međunarodno kristalografsko udruženje (odnosno V. Kopsky i D. B. Litvin) već godinama radi na sistematizaciji simetrija subperiodičnih sistema, kao i na uvođenju jedinstvenih oznaka

holoedrije, a neki od ortogonalnih elemenata mogu biti simetrije kristala tek u kombinaciji sa translacijama.

Svaki kristal jednoznačno određuje svoju translacionu grupu simetrije \mathbf{T} , a svaka takva grupa daje kristalnu rešetku i njenu simetriju P_H . Pored ovoga, realni, diperiodični, kristal zadaje i svoju grupu svih geometrijskih transformacija, diperiodičnu grupu kristala, \mathbf{Dg} . Jasno je da grupa \mathbf{Dg} sadrži sve čiste translacije, tj. \mathbf{T} je njena podgrupa. Pri tome, ako je $(R|\mathbf{r})$ proizvoljni element grupe \mathbf{Dg} , a $(I|\mathbf{t})$ neki element iz \mathbf{T} , zbog zatvorenosti grupnog množenja je i konjugovani element $(R|\mathbf{r})(I|\mathbf{t})(R|\mathbf{r})^{-1} = (I|R\mathbf{t})$ iz \mathbf{Dg} . Dobijeni element $(I|R\mathbf{t})$ je čista translacija, te mora pripadati grupi \mathbf{T} , što znači da je translaciona podgrupa invarijantna u \mathbf{Dg} , ali i da ortogonalni faktor R bilo kog elementa grupe \mathbf{Dg} održava rešetku, odnosno da je element grupe P_H . Skup svih takvih ortogonalnih elemenata, koji kombinovani sa nekom translacijom daju simetriju kristala, čini izogonalnu aksijalnu tačkastu grupu, P_I . Ona je podgrupa u P_H , ali ni jedna ni druga u opštem slučaju nisu simetrije kristala. U tabeli 1.1 date su sve moguće izogonalne grupe za svaku od holoedrija. Izogonalna grupa se često naziva grupom simetrije smerova, i opisuje makroskopske simetrije kristala, odnosno može poslužiti za opisivanje onih osobina kristala koje ne zavise od detalja rasporeda atoma duž određenog smera.

Tabela 1.1: Diperiodične grupe: u tabeli su dati kristalni sistemi, broj različitih Bravais-ovih rešetki za svaku holoedriju, holoedrije P_H i odgovarajuće kristalne klase, odnosno izogonalne grupe P_I (sa brojem diperiodičnih grupa za svaku klasu). Zvezdica u koloni u kojoj je broj Bravais-ovih rešetki za ortorombične sisteme znači da su uzete u obzir i centrirane rešetke.

	Sistem	Br	P_H	P_I
1	Monoklinični	1	C_{2h}	$C_1(1), S_2(1), C_2(1), C_{1h}(2), C_{2h}(2)$
2	Ortorombični	2*	D_{2h}	$D_1(3), C_{1v}(3), D_{1d}(5), D_2(4), C_{2v}(4), D_{1h}(10), D_{2h}(12)$
3	Tetragonalni	1	D_{4h}	$C_4(1), S_4(1), C_{4h}(2), D_4(2), C_{4v}(2), D_{2d}(4), D_{4h}(4)$
4	Heksagonalni	1	D_{6h}	$C_3(1), S_6(1), D_3(2), C_{3v}(2), D_{3d}(2), C_6(1),$ $C_{3h}(1), C_{6h}(1), D_6(1), C_{6v}(1), D_{3h}(2), D_{6h}(1)$

Ako je $R \in P_I$, tada postoji vektor \mathbf{r} takav da je $(R|\mathbf{r}) \in \mathbf{Dg}$. Time je određen tačno jedan koset $(R|\mathbf{r})T = \{(R|\mathbf{r} + \mathbf{t})\}$ translacione podgrupe u \mathbf{Dg} . U njemu se nalazi tačno jedan predstavnik $(R|\mathbf{f}_R)$, takav da je \mathbf{f}_R vektor iz unutrašnjosti elementarne ćelije kristala. Ukoliko je $\mathbf{f}_R \neq 0$, R nije simetrija kristala, a \mathbf{f}_R se tada naziva frakcionom translacijom, tako se nalaze zavojne ose ($C_n|\mathbf{f}$) i klizne ravni ($\sigma|\mathbf{f}$). Zbog toga što bilo koji element $R \in P_I$ mora da ostavi invarijantnom ravan rešetke postoji samo jedan tip zavojne ose ($U|\mathbf{f}$), gde je U rotacija za π oko ose koja leži u ravni rešetke, kao i dva tipa kliznih ravni ($\sigma_v|\mathbf{f}$) i ($\sigma_h|\mathbf{f}$), gde je σ_v vertikalna ravan refleksije (ortogonalna na ravan rešetke), a σ_h horizontalna ravan refleksije (u ravni rešetke). Osim toga frakciona translacija mora biti oblika $\mathbf{f} = \frac{1}{2}\mathbf{t}$, gde je $\mathbf{t} \in \mathbf{T}$, zbog toga što svaki parni stepen generatora zavojne ose ili klizne ravni mora biti čista translacija (paran stepen ortogonalnog dela je jedinični element). Elementi diperiodičnih grupa oblika $(R|\mathbf{f})$ se nazivaju generalisanim translacijama.

Translaciona i izogonalna aksijalna tačkasta grupa, zajedno sa frakcionim translacijama određuju diperiodičnu grupu. Različitim izborima frakcionih translacija se u jednoj kristalnoj

klasi nalaze kristali različitih simetrija. Uz relaciju po kojoj su dve diperiodične grupe ekvivalentne ako su međusobno konjugovane podgrupe u Euklidovoj grupi, nalazi se ukupno 80 neekvivalentnih diperiodičnih grupa, svrstanih u 30 klasa (tabela 1.1). Za sve njih je zajedničko da im je translaciona podgrupa invarijantna, a odgovarajuća faktor-grupa je izomorfna izogonalnoj grupi. Ako je i izogonalna grupa podgrupa diperiodične grupe, odnosno, ako su sve frakcione translacije jednake nuli, struktura diperiodične grupe je $\mathbf{Dg} = T \wedge P_I$, i kaže se da je \mathbf{Dg} simorfna (ukupno ih je 42).

Invarijantnost translacione podgrupe omogućava nalaženje ireducibilnih reprezentacija diperiodičnih grupa indukcijom metodom, za simorfne grupe. Postavlja se pitanje da li je moguće i nesimorfne grupe faktorizovati kao proizvod generalisanih translacija i aksijalne tačkaste grupe. Pozitivan odgovor na ovo pitanje daje sledeći odeljak.

1.1.2 Faktorizacija diperiodičnih grupa

Diperiodične grupe su faktorizabilne, odnosno svaka diperiodična grupa je, u opštem slučaju, slabi direktni proizvod grupe dvodimenzionalnih generalisanih translacija i neke od dozvoljenih 1.1.1 aksijalnih tačkastih grupa. Dvodimenzionalne generalisane translacije su, u opštem slučaju, slabi direktni proizvod dozvoljenih jednodimenzionalnih translacija. Kao što je rečeno u prethodnom odeljku dozvoljene jednodimenzionalne generalisane translacije su generisane sa: $(U_a|\frac{1}{2}\mathbf{a})$, $(\sigma_{va}|\frac{1}{2}\mathbf{a})$ i $(\sigma_h|\frac{1}{2}\mathbf{a})$; gde je \mathbf{a} proizvoljan vektor translacije, koji generiše translacionu grupu. Ove jednodimenzionalne generalisane translacije čine *linijske grupe*. U dokazu faktorizabilnosti diperiodičnih grupa prvo su nađene sve moguće dvodimenzionalne generalisane translacije \mathbf{Z} (tabela 1.2).

Tabela 1.2: Dvodimenzionalne generalisane translacije: u prvoj koloni su date oznake generalisanih translacija, u drugoj je data faktorizacija dvodimenzionalnih generalisanih translacija na jednodimenzionalne generalisane translacije, u sledećoj koloni su dati generatori grupa generalisanih translacija, dok je u poslednjoj koloni dat ugao između bazisnih vektora običnih translacija. U donjem delu tabele se nalaze specijalni slučajevi generalisanih translacija.

\mathbf{Z}	Struktura	Generatori	$\angle(\mathbf{a}, \mathbf{b})$
\mathbf{T}	$T_a \otimes T_b$	$(I \mathbf{a}), (I \mathbf{b})$	
\mathbf{T}_h	$T_a \otimes T_h^b$	$(I \mathbf{a}), (\sigma_h \frac{1}{2}\mathbf{b})$	
\mathbf{T}_v	$T_a \wedge T_v^b$	$(I \mathbf{a}), (\sigma_b \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
$\mathbf{2}_1$	$T_a \wedge 2_1^b$	$(I \mathbf{a}), (U_b \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
	$2_1^a T_h^b$	$(U_a \frac{1}{2}\mathbf{a}), (\sigma_h \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
\mathbf{T}'		$(I \mathbf{a}), (I \frac{1}{2}\mathbf{a} \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
\mathbf{T}'_h		$(I \mathbf{a}), (\sigma_h \frac{1}{2}\mathbf{a} \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
\mathbf{T}'_v		$(I \mathbf{a}), (\sigma_b \frac{1}{2}\mathbf{a} \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$
$\mathbf{2}'_1$		$(I \mathbf{a}), (U_b \frac{1}{2}\mathbf{a} \frac{1}{2}\mathbf{b})$	$\pi/2$

Dopunjavanjem generalisanih translacija elementima izogonalnih aksijalnih tačkastih grupa dobijaju se sve diperiodične grupe. Ovim je pokazano da je svaka diperiodična grupa, u

opštem slučaju, slabi direktni proizvod aksijalne tačkaste grupe i dvodimenzionalne generalisane translacije:

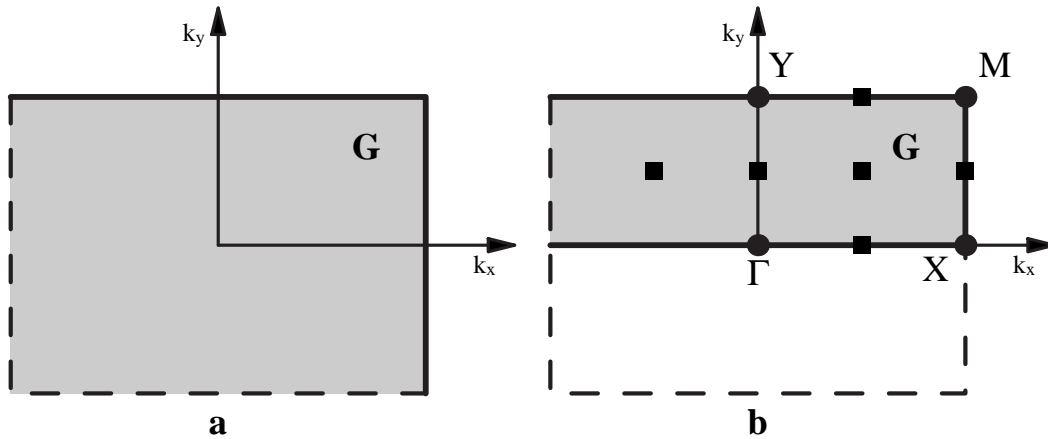
$$\mathbf{DG} = \mathbf{PZ}, \quad (1.1)$$

gde je \mathbf{P} aksijalna tačkasta grupa, a \mathbf{Z} je grupa generalisanih translacija (tabela 1.2). U tabeli 1.3 je data faktorizacija svih 80 diperiodičnih grupa, pored toga date su sve holodrije i izogonalne grupe, redni broj iz rada [1], kao i međunarodne oznake za svaku grupu. U dodatku A je data tabela u kojoj su paralelno dati redni brojevi i međunarodne oznake, sa rednim brojevima i oznakama koje su date u tabelama Međunarodne kristalografske unije [3].

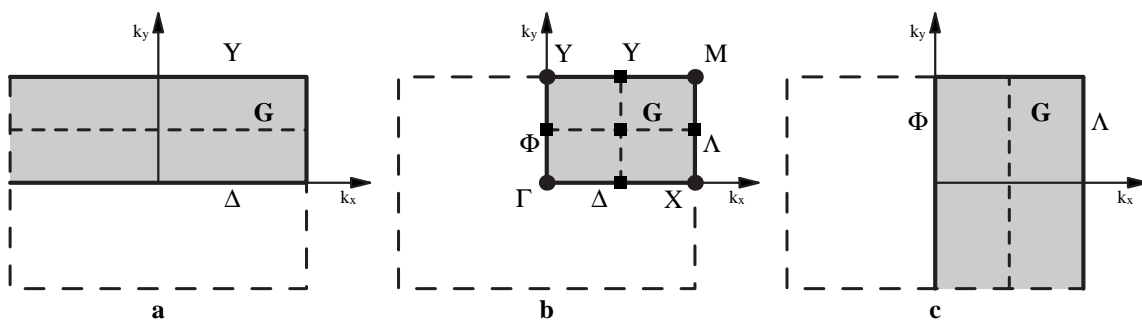
1.2 Reprezentacije diperiodičnih grupa

Faktorizacija diperiodičnih grupa nije samo bitna zbog alternativnog načina dobijanja svih 80 grupa, već prevashodno zbog toga što omogućava nalaženje ireducibilnih reprezentacija korišćenjem indukcije (kao što je svojevremeno urađeno za linijske grupe [4]). Faktorizacija daje i generatore diperiodičnih grupa, dva generatora za generalisane translacije \mathbf{Z} , kao i najviše tri generatora za aksijalnu tačkastu grupu \mathbf{P} . Pošto su reprezentacije cele grupe potpuno određene reprezentacijama generatora dovoljno je neći ireducibilne reprezentacije generatora. U tabelama u radu [2] su upravo date reprezentacione matrice generatora. Ireducibilne reprezentacije diperiodičnih grupa su delimično nađene ranije [5], odnosno bile su nađene samo u specijalnim tačkama *Brillouin*-ove zone. U radu [2] su date sve ireducibilne reprezentacije. Sa druge strane faktorizacija daje optimalan metod za konstrukciju ireducibilnih reprezentacija, tačnije, omogućava grupisanje grupa u lance, takve da je svaka grupa u lancu podgrupa indeksa 2 naredne grupe u lancu (lanci indukcije su dati u dodatku rada [2]). Činjenica da su mnoge grupe podgrupe indeksa 2 nekih drugih diperiodičnih grupa omogućava primenu najjednostavnijeg metoda indukcije, indukcije sa podgrupe indeksa 2 [6]. Početna grupa u svakom lancu ima već izvedene reprezentacije, ili je direktan ili semidirektan proizvod podgrupa. U slučaju kada reprezentacije prve grupe u lancu nisu poznate korišćena je indukcija sa *Abel*-ove podgrupe, ili indukcija za slučaj kada je grupa direktan proizvod podgrupa ([7], [6]).

Nalaženje ireducibilnih reprezentacija nužno daje i ireducibilne domene u *Brillouin*-ovoj zoni. Ireducibilni domeni *Brillouin*-ovih zona su prikazani na slikama 1.2, 1.3, 1.4, 1.5. Dimenzije ireducibilnih reprezentacija diperiodičnih grupa mogu biti 1, 2, 3, 4, 6, 8 i 12. Sve ireducibilne reprezentacije diperiodičnih grupa su prve ili treće vrste.



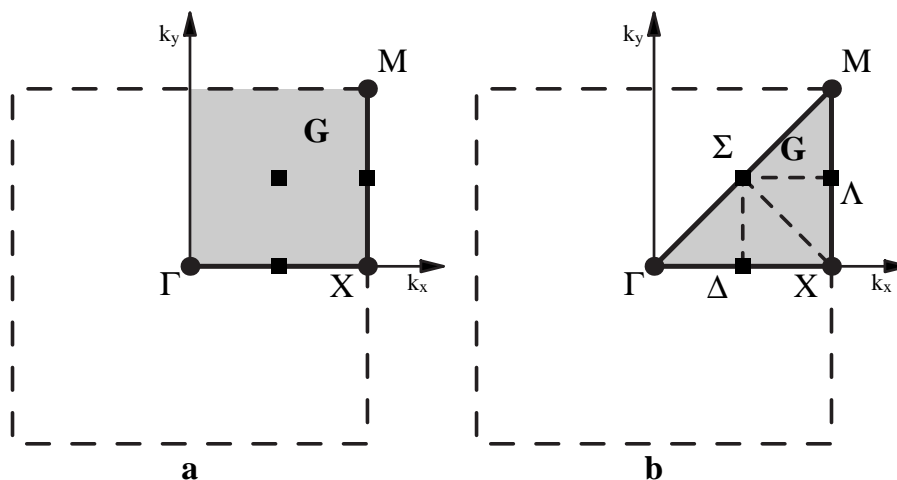
Slika 1.2: Ireducibilni domeni Brillouin-ovih zona za iskošene diperiodične grupe. Koordinate specijalnih tačaka (crni kružići) su: $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$, $Y = (0, \pi)$ i $M = (\pi, \pi)$. Kvadratićima su označene specijalne tačke simetrizovanih kvadrata, koje su date u tabeli C.1.



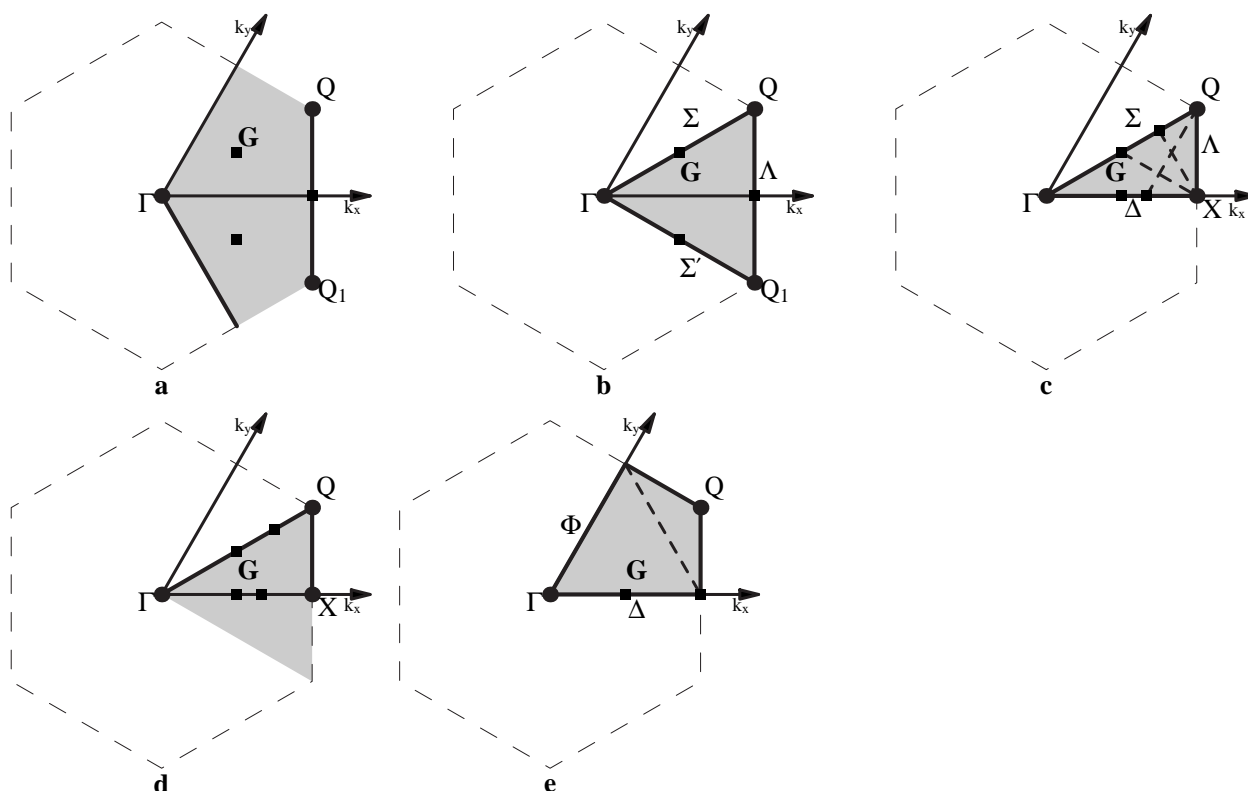
Slika 1.3: Ireducibilni domeni Brillouin-ovih zona za ortorombične diperiodične grupe. Koordinate specijalnih tačaka (crni kružići) su: $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$, $Y = (0, \pi)$ i $M = (\pi, \pi)$, dok su specijalne linije $\Delta = (k, 0)$, $\Upsilon = (k, \pi)$, $\Phi = (0, k)$ i $\Lambda = (\pi, k)$. Koordinate specijalnih tačaka simetrizovanih kvadrata su date u tabeli C.1.

Tabela 1.3: **Faktorizacija diperiodičnih grupa.** Za svaku diperiodičnu grupu Dg , date su holodrija fH , izogonalna tačkasta grupa I , faktorizacija PT i međunarodni simbol dat u radu [1]. U poslednjoj koloni je dat broj tabele iz rada [2], u kojoj se nalaze ireducibilne reprezentacije date grupe.

Dg	H	I	P T	Int. simb.	Tabela	Dg	H	I	P T	Int. simb.	Tabela	
1	C_{2h}	C_1	T	p1	2	41	D_{2h}	D_{2h}	$C_{2v}T_h$	$p_{\frac{2}{a} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	11	
2		S_2	S_2T	p1	3	42		D_{2h}	$D_{1d}T'_h$	$p_{\frac{2}{n} \frac{2}{m} \frac{2}{a}}$	17	
3		C_2	C_2T	p211	3	43		D_{2h}	$D_{12_1}T'_h$	$p_{\frac{2}{a} \frac{2}{b} \frac{2}{a}}$	12	
4		C_{1h}	$C_{1h}T$	pm11	2	44		D_{2h}	$C_{2h}T'_v$	$p_{\frac{2}{m} \frac{2}{b} \frac{2}{a}}$	15	
5		C_{1h}	T_h	pb11	2	45		D_{2h}	$C_{22_1}T'_h$	$p_{\frac{2}{a} \frac{2}{b} \frac{2}{m}}$	10	
6		C_{2h}	$C_{2h}T$	$p_{\frac{2}{m}}^2 11$	3	46		D_{2h}	$C_{2v}T'_h$	$p_{\frac{2}{n} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	17	
7		C_{2h}	C_2T_h	$p_{\frac{2}{b}}^2 11$	4	47		D_{2h}	$D_{2h}T'$	$c_{\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	14	
8	D_{2h}	D_1	D_1T	p112	5	48	D_{4h}	D_{2h}	$C_{2v}T'_h$	$c_{\frac{2}{a} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	18	
9		D_1	2_1	p112 ₁	7	49		C_4	C_4T	p4	19	
10		D_1	D_1T'	c112	13	50		S_4	S_4T	p4	19	
11		C_{1v}	$C_{1v}T$	p11m	5	51		C_{4h}	$C_{4h}T$	p4/m	19	
12		C_{1v}	T_v	p11a	7	52		C_{4h}	$C_4T'_h$	p4/n	20	
13		C_{1v}	$C_{1v}T'$	c11m	13	53		D_4	D_4T	p422	21	
14		D_{1d}	$D_{1d}T$	$p11 \frac{2}{m}$	6	54		D_4	$C_42'_1$	p42 ₁ 2	22	
15		D_{1d}	S_22_1	$p11 \frac{2}{a}$	8	55		C_{4v}	$C_{4v}T$	p4mm	21	
16		D_{1d}	$D_{1d}T'$	$c11 \frac{2}{m}$	14	56		C_{4v}	$C_4T'_v$	p4bm	22	
17		D_{1d}	S_2T_v	$p11 \frac{2}{a}$	8	57		D_{2d}	$D_{2d}T$	p42m	21	
18		D_{1d}	$S_2T'_v$	$p11 \frac{2}{a}$	15	58		D_{2d}	$S_42'_1$	p42 ₁ m	22	
19		D_2	D_2T	p222	6	59		D_{2d}	$D_{2d}T$	p4m2	21	
20		D_2	C_22_1	p222 ₁	8	60		D_{2d}	$S_4T'_v$	p4b2	22	
21		D_2	$C_22'_1$	p22 ₁ 2 ₁	15	61		D_{4h}	$D_{4h}T$	$p_{\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	21	
22		D_2	D_2T'	c222	14	62		D_{4h}	$D_{2d}T'_h$	$p_{\frac{4}{a} \frac{2}{b} \frac{2}{m}}$	23	
23		C_{2v}	$C_{2v}T$	p2mm	6	63		D_{4h}	$C_{4h}T'_v$	$p_{\frac{4}{m} \frac{2}{b} \frac{2}{m}}$	22	
24		D_{1h}	$D_{1h}T$	pmm2	5	64		D_{4h}	$D_{2d}T'_h$	$p_{\frac{4}{n} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	23	
25		D_{1h}	$C_{1h}2_1$	pm2 ₁ a	7	65		D_{6h}	C_3	C_3T	p3	24
26		D_{1h}	$C_{1v}2_1$	pbm2 ₁	7	66			S_6	S_6T	p3	27
27		D_{1h}	D_1T_v	pbb2	7	67			D_3	D_3T	p312	26
28		C_{2v}	C_2T_v	p2ma	8	68			D_3	D_3T	p321	25
29		D_{1h}	D_1T_h	pam2	9	69			C_{3v}	$C_{3v}T$	p3m1	26
30		D_{1h}	2_1T_h	pab2 ₁	9	70			C_{3v}	$C_{3v}T$	p31m	25
31		D_{1h}	$D_1T'_h$	pnb2	13	71			D_{3d}	$D_{3d}T$	$p31 \frac{2}{m}$	28
32		D_{1h}	$C_{1v}T'_h$	p nm2 ₁	13	72			D_{3d}	$D_{3d}T$	$p3 \frac{2}{m} 1$	28
33		C_{2v}	$C_2T'_v$	p2ba	15	73			C_6	C_6T	p6	27
34		C_{2v}	$C_{2v}T'$	c2mm	14	74			C_{3h}	$C_{3h}T$	p6	24
35		D_{1h}	$D_{1h}T'$	cmm2	13	75			C_{6h}	$C_{6h}T$	p6/m	27
36		D_{1h}	$D_1T'_h$	cam2	16	76			D_6	D_6T	p622	28
37		D_{2h}	$D_{2h}T$	$p_{\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	6	77			C_{6v}	$C_{6v}T$	p6mm	28
38		D_{2h}	D_2T_h	$p_{\frac{2}{a} \frac{2}{m} \frac{2}{a}}$	11	78			D_{3h}	$D_{3h}T$	p6m2	26
39		D_{2h}	$D_2T'_h$	$p_{\frac{2}{n} \frac{2}{b} \frac{2}{a}}$	17	79			D_{3h}	$D_{3h}T$	p62m	25
40	D_{2h}	$C_{2h}T_v$	$p_{\frac{2}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{a}}$	8	80	D_{6h}	$D_{6h}T$		$p_{\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	28		



Slika 1.4: Ireducibilni domeni *Brillouin*-ovih zona za tetragonalne diperiodične grupe. Koordinate specijalnih tačkaka (crni kružići) su: $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$ i $M = (\pi, \pi)$, dok su specijalne linije $\Delta = (k, 0)$, $\Lambda = (\pi, k)$ i $\Sigma = (k, k)$, gde je $k \in (0, \pi)$. Koordinate specijalnih tačkaka simetrizovanih kvadrata su date u tabeli C.1.



Slika 1.5: Ireducibilni domeni *Brillouin*-ovih zona za heksagonalne diperiodične grupe. Koordinate specijalnih tačkaka (crni kružići) su: $\Gamma = (0, 0)$, $X = (\pi, 0)$, $Q = (\frac{2\pi}{3}, \frac{2\pi}{3})$ i $Q' = (\frac{4\pi}{3}, -\frac{2\pi}{3})$, dok su specijalne linije $\Delta = (k, 0)$ (za $k \in (0, \pi)$), $\Phi = (0, k)$ (za $k \in (0, \pi)$), $\Sigma = (k, k)$ (za $k \in (0, \frac{2\pi}{3})$), $\Sigma' = (k, -\frac{k}{2})$ (za $k \in (0, \frac{4\pi}{3})$) i $\Lambda = (k, 2\pi - 2k)$ (gde je $k \in (\frac{2\pi}{3}, \pi)$ za grupe sa glavnom osom šestog reda, i $k \in (\frac{2\pi}{3}, \frac{4\pi}{3})$ za grupe sa glavnom osom trećeg reda). Koordinate specijalnih tačkaka simetrizovanih kvadrata su date u tabeli C.1.

Glava 2

Dinamika rešetke

2.1 Normalne mode kristala

Harmonijsko oscilovanje je jedan od osnovnih vidova dinamike svakog sistema, pa tako i kristalne rešetke. Mogućnost njegovog egzaktnog opisa i u klasičnoj i u kvantnoj teoriji uzrokovala je da se i mnogo složeniji dinamički problemi svode na približni, oscilatorni. Upravo ta tehnika, harmonijske aproksimacije, u korenu je svake kvazičestične interpretacije složenih dinamičkih sistema.

2.1.1 Harmonijski potencijal

Složeni fizički sistem, sastavljen od n gradivnih elemenata (u daljem tekstu će se gradivni elementi nazivati atomima, imajući u vidu da u konkretnom fizičkom sistemu mogu biti to mogu biti joni, molekuli i sl.), opisan je $6n$ -dimenzionalnim faznim prostorom u klasičnoj mehanici [8]; u kvantnoj mehanici tome odgovara orbitalni *Hilbert*-ov prostor sa po $3n$ koordinata i impulsa u osnovnom skupu opservabli. Svakom atomu pridružuju se po tri koordinate u konfiguracionom i impulsnom prostoru, čime se nalazi bazis celog prostora:

$$\{ | \mathbf{q}, \alpha i \rangle, | \mathbf{p}, \alpha i \rangle \mid \alpha = 1, \dots, n; i = 1, 2, 3 \}. \quad (2.1)$$

Time vektor $\sum_{\alpha i} (q_{\alpha i} | \mathbf{q}, \alpha i \rangle + p_{\alpha i} | \mathbf{p}, \alpha i \rangle)$ iz faznog prostora postaje kolona koordinata $\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix} = (q_{11}, \dots, p_{n3})^T$. Bazis (2.1) je odabran tako da su zadovoljene kanonične komutacione relacije:

$$[q_{\alpha i}, q_{\beta j}] = [p_{\alpha i}, p_{\beta j}] = 0, \quad [q_{\alpha i}, p_{\beta j}] = c \delta_{\beta}^{\alpha} \delta_j^i$$

Pri kanonskim transformacijama, promena bazisa u konfiguracionom prostoru praćena je kontragredijentnom promenom bazisa impulsnog prostora, i obratno.

Ako se položaj stabilne ravnoteže sistema, tj. minimuma potencijalne energije, odabere za koordinatni početak, koordinata $q_{\alpha i}$ je odklon atoma α od ravnotežnog položaja u i -tom pravcu. Razvojem potencijala u red po ovim pomerajima, zaključno sa kvadratnim članovima (harmonijska aproksimacija), za hamiltonijan sistema nalazi se:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\alpha i} \frac{1}{m_{\alpha}} p_{\alpha i}^2 + \frac{1}{2} \sum_{\alpha \beta i j} V_{\beta j}^{\alpha i} q_{\alpha i} q_{\beta j} = \frac{1}{2} (q, p) \mathbf{H} \begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H} = \begin{pmatrix} V & 0 \\ 0 & M^{-1} \end{pmatrix}, \quad (2.2)$$

gde je matrica $V = (V_{\beta j}^{\alpha i}) = (\frac{\partial^2 V(0)}{\partial q_{\alpha i} \partial q_{\beta j}})$ simetrična i nenegativna (jer je u pitanju minimum potencijala), dok je $M = (M_{\beta j}^{\alpha i}) = (m_{\alpha} \delta_{\beta}^{\alpha} \delta_j^i)$ pozitivna matrica. Na ovaj način hamiltonijan je zadat matricom \mathbf{H} . Iz hamiltonijana se uvek mogu izostaviti konstantni sabirci, a prvi izvodi potencijala u tački ravnoteže su jednaki nuli, tako da u jednačini 2.2 nedostaju $V(0)$ i linearni članovi.

Ukoliko bi matrica V bila dijagonalna, ceo sistem bi se mogao razmatrati kao skup $3n$ neinteragujućih linearnih harmonijskih oscilatora, sa dobro poznatim svojstvima i u klasičnoj i u kvantnoj teoriji. Pošto je simetrična i pozitivna ona se može dijagonalizovati razmatranjem problema u svojstvenom bazu. No, zbog obavezne kanoničnosti, prelazak na svojstveni bazis u konfiguracionom je i transformacija u impulsnom prostoru, čime tek obezbeđena dijagonalnost V može značiti pojavu nedijagonalnih članova u kinetičkoj energiji. Da bi se to izbeglo pribegava se promeni skalarnog proizvoda: novi skalarni proizvod u impulsnom prostoru zadaje se pozitivnom dijagonalnom matricom M^{-1} kao metrikom. Bazisni vektori $|\mathbf{p}, \alpha i\rangle$ ostaju ortogonalni, ali ne i normirani, te se normiraju, množenjem sa $\sqrt{m_{\alpha}}$. Kanoničnost transformacije se obezbeđuje uvođenjem M kao metrike u konfiguracionom prostoru. Na taj način kinetička energija određuje metriku celog faznog prostora, a time i ortonormirani bazis:

$$\{|\mathbf{Q}, \alpha i\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_{\alpha}}} |\mathbf{q}, \alpha i\rangle, \quad |\mathbf{P}, \alpha i\rangle = \sqrt{m_{\alpha}} |\mathbf{p}, \alpha i\rangle \mid \alpha = 1, \dots, n; i = 1, 2, 3\}. \quad (2.3)$$

Tačka sa koordinatama $\begin{pmatrix} q \\ p \end{pmatrix}$ u bazu (2.1) se u bazu (2.3) reprezentuje kolonom $\begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix}$, sa koordinatama $Q_{\alpha i} = \sqrt{m_{\alpha}} q_{\alpha i}$, $P_{\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{m_{\alpha}}} p_{\alpha i}$. Uz pomoć *dinamičke matrice*

$$W = M^{-\frac{1}{2}} V M^{-\frac{1}{2}}, \quad W_{\beta j}^{\alpha i} = \frac{1}{\sqrt{m_{\alpha} m_{\beta}}} V_{\beta j}^{\alpha i},$$

koja je nasledila simetričnost i nenegativnost od V , (2.2) postaje:

$$H = \frac{1}{2} (Q, P) \mathbf{H}_M \begin{pmatrix} Q \\ P \end{pmatrix}, \quad \mathbf{H}_M = \begin{pmatrix} W & 0 \\ 0 & I \end{pmatrix}. \quad (2.4)$$

Invarijantnost jedinične matrice (impulsni prostor) pri transformacijama sličnosti obezbeđuje dijagonalnost kinetičke energije nakon promene bazisa. Prema tome, treba odrediti svojstveni bazis za W , odakle se nalazi i kompletan bazis faznog prostora:

$$\{|\mathbf{Q}, \omega_k l\rangle, |\mathbf{P}, \omega_k l\rangle \mid l = 1, \dots, n_k, \sum_k n_k = 3n\}, \quad W |\mathbf{Q}, \omega_k l\rangle = \omega_k^2 |\mathbf{Q}, \omega_k l\rangle.$$

U koordinatama Q_{ki}, P_{ki} ovog bazisa hamiltonijan dobija poznatu formu (u kvantnoj teoriji kompleksna konjugacija postaje adjungovanje):

$$H = \frac{1}{2} \sum_{ki} (P_{ki}^2 + \omega_k^2 Q_{ki}^2) = \frac{1}{2} \sum_{ki} \hbar \omega_k (b_{ki}^* b_{ki} + b_{ki} b_{ki}^*). \quad (2.5)$$

Drugi izraz je u koordinatama bazisa

$$\{|\mathbf{b}, ki\rangle = \sqrt{\hbar} \frac{|\mathbf{Q}, \omega_k i\rangle - i\omega_k |\mathbf{P}, \omega_k i\rangle}{\sqrt{2\omega_k}}, \quad |\mathbf{b}^*, ki\rangle = \sqrt{\hbar} \frac{|\mathbf{Q}, \omega_k i\rangle + i\omega_k |\mathbf{P}, \omega_k i\rangle}{\sqrt{2\omega_k}}\}. \quad (2.6)$$

Pri tome su zadovoljene bozonske komutacione relacije:

$$[b_{ki}, b_{lj}^*] = b\delta_i^k\delta_j^l, \quad [b_{ki}, b_{lj}] = [b_{ki}^*, b_{lj}^*] = 0$$

($b = -i$ i $b = 1$ u klasičnoj i kvantnoj mehanici). Vektori svojstvenog bazisa određuju nezavisne načine kretanja sistema kao celine, jer su linearne kombinacije vektora različitih atoma, i zato se nazivaju *normalnim modama*. Kada je sistem u ravnotežnom položaju, sve normalne koordinate su jednake nuli, te nenultost neke od njih može da se shvati kao ekscitacija sistema. Dinamika sistema u okolini ravnotežnog položaja se svodi na nezavisno pobuđivanje pojedinih normalnih ekscitacija. Zato se normalne ekscitacije u nekim fizičkim teorijama nazivaju kvazi-česticama, a stanje minimuma, kada ovih nema, vakuum. Kada prilikom kvantizacije bozonske koordinate postanu operatori b_{ki}^\dagger i b_{ki} , hamiltonijan ima dobro poznati oblik $H = \sum_{ki} \hbar\omega_k(b_{ki}^\dagger b_{ki} + \frac{1}{2})$, a ekvidistantnost svojstvenih vrednosti pojedinih sabiraka ($\hbar\omega_k(n_{ki} + \frac{1}{2})$, $n_{ki} = 0, 1, \dots$) opravdava čestičnu sliku: iz stanja $|\dots, n_{ki}, \dots\rangle$, operator b_{ki}^\dagger prevodi sistem u stanje $|\dots, n_{ki} + 1, \dots\rangle$, kreirajući iz vakuuma bozon energije $\hbar\omega_k$.

2.1.2 Primena simetrije

Određivanje normalnih moda zahteva rešavanje svojstvenog problema matrice W , a time i H , jer je u impulsnom prostoru bazis određen kanoničnošću. Poznavanje simetrije sistema takav zadatak uprošćava, ponekad ga čak i potpuno rešava.

Za primenu grupno-teorijskih metoda [9] osnovno je uočiti da se konfiguracioni prostor $\mathcal{H}_q = \mathbb{R}^{3n}$ može shvatiti kao prostor \mathbb{R}^n , u kome svaki vektor apsolutnog bazisa opisuje jednu česticu, pri čemu svaka čestica unosi prostor \mathbb{R}^3 , u kome se opisuje njen položaj. Na taj način je $\mathcal{H}_q = \mathbb{R}^n \otimes \mathbb{R}^3$. Bazisi $\{|\mathbf{q}, \alpha i\rangle = |\alpha\rangle |i\rangle\}$ i $\{|\mathbf{Q}, \alpha i\rangle = \frac{1}{\sqrt{m_\alpha}}|\alpha\rangle |i\rangle\}$ su nekorelisani bazisi ovog proizvoda. Sve isto važi i za impulzni prostor \mathcal{H}_p , te je fazni prostor $\mathcal{H} = \mathcal{H}_q \oplus \mathcal{H}_p = \mathbb{R}^n \otimes (\mathbb{R}^3 \oplus \mathbb{R}^3)$. Geometrijske transformacije koje ostavljaju sistem nepromenjenim se mogu faktorisati tako da jedan faktor odražava preslikavanje među različitim atomima (naravno, iste vrste), odnosno predstavlja permutaciju sistema, a drugi opisuje transformaciju u \mathbb{R}^3 na standardni način (polarno-vektorska reprezentacija i za koordinate i za impulse). Tako elementu g grupe simetrije G sistema odgovara u \mathcal{H}_q (i u \mathcal{H}_p) ortogonalna matrica $D^d(g) \stackrel{\text{def}}{=} D^p(g) \otimes D^v(g)$, $D^d(g)|\mathbf{Q}, \alpha i\rangle = \sum_{\beta j} D^{p\beta}_\alpha(g) D^{vj}_i(g)|\mathbf{Q}, \beta j\rangle$, tj. $D^{d\beta j}_{\alpha i}(g) = D^{p\beta}_\alpha(g) D^{vj}_i(g)$. $D^p(G)$ je permutaciona reprezentacija grupe G , koja opisuje dejstvo grupe na atomima datog sistema, dok je $D^v(G)$ polarno-vektorska reprezentacija G , koja daje geometrijsku interpretaciju elemenata grupe i ne zavisi od sistema.

Na ovaj način formirana dinamička reprezentacija grupe G , komutira sa M i V , pa i sa W . Dalje sledi obična procedura određivanja standardnog svojstvenog bazisa. Za svaku ireducibilnu reprezentaciju koja se pojavljuje pri razlaganju $D^d(G)$, odredi se grupni projektor $P_1^{(\mu)}$ i njegova oblast likova $\mathcal{H}_{q1}^{(\mu)}$. U tim potprostorima W se redukuje, pa se rešava svojstveni problem matrice $W(\mu 1) = P_1^{(\mu)}W$, i nalazi standardni svojstveni bazis u \mathcal{H}_q :

$$\{|\mathbf{Q}, \mu t_\mu m\rangle \mid \mu = 1, \dots, s; t_\mu = 1, \dots, a_\mu; m = 1, \dots, n_\mu\} \quad W|\mathbf{Q}, \mu t_\mu m\rangle = \omega^2(\mu t_\mu)|\mathbf{Q}, \mu t_\mu m\rangle.$$

Kanoničnošću je, kao i do sada, određen bazis $|\mathbf{P}, \mu t_\mu m\rangle$ u \mathcal{H}_p .

U gornjem postupku su korišćene kompleksne reprezentacije grupe G , te je, implicitno, umesto prostora \mathbb{R}^{3n} , konfiguracija opisivana u kompleksifikovanom prostoru \mathcal{C}^{3n} , i uvedeno $3n$

suvišnih stepeni slobode (jer je skupovno $\mathcal{C}^{3n} = \mathbb{R}^{6n}$). Treba zapaziti da vektori $|\mathbf{P}, \mu t_\mu m\rangle$, zbog kontragredijentnosti promene, obrazuju potprostor reprezentacije $D^{(\mu)*}(G)$ u impulsnom prostoru. Koordinate i impulsi, $Q_{\mu t_\mu m}$ i $P_{\mu t_\mu m}$, ne moraju biti realni, te skalarni proizvod (2.4) postaje:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mu, t_\mu, m} (P_{\mu t_\mu m}^* P_{\mu t_\mu m} + \omega^2(\mu t_\mu) Q_{\mu t_\mu m}^* Q_{\mu t_\mu m}),$$

gde su $Q_{\mu t_\mu m}^*$, $Q_{\mu t_\mu m}$, $P_{\mu t_\mu m}^*$ i $P_{\mu t_\mu m}$ nezavisne promenljive. Sa druge strane, već iz postavke problema, tj. izraza (2.5), sledi da je moguće naći realne koordinate. Na jeziku teorije grupa rešenje ovog prividnog problema je u realnosti reprezentacije $D^d(G)$:

- i ako je $D^{(\mu)}(G)$ realna reprezentacija (I vrste), onda je $W(\mu 1)$ simetrična matrica, pa su i odgovarajući svojstveni vektori realni, tako da se pomeraji izražavaju realnim koordinatama;
- ii ako je $D^{(\mu)}(G)$ pseudorealna reprezentacija (II vrste), tada je a_μ parno, degeneracija svojstvenih vrednosti hermitskog operatora $W(\mu 1)$ je parna, i može se odabrati bazis koji je realan, na isti način, i sa istim posledicama kao
- iii u slučaju kada je $D^{(\mu)}(G)$ kompleksna reprezentacija (III vrste) i važi da je $a_\mu = a_{\mu^*}$, a $W(\mu 1) = W^*(\mu^* 1)$ (sa μ^* je označena reprezentacija konjugovana μ -toj). Kako su i $W(\mu 1)$ i $W(\mu^* 1)$ hermitski operatori, sa realnim svojstvenim vrednostima, iz poslednje relacije sledi da su im svojstvene vrednosti iste, a da su odgovarajući svojstveni vektori, reprezentovani u bazisu (2.3), kompleksno konjugovani: $\langle \mathbf{Q}, \alpha i | \mathbf{Q}, \mu t_\mu m \rangle = \langle \mathbf{Q}, \alpha i | \mathbf{Q}, \mu^* t_{\mu^*} m \rangle^*$ za $t_\mu = t_{\mu^*}$.

Drugim rečima, kako je dinamička reprezentacija realna, a početni hamiltonijan invarijantan na vremensku inverziju, radi se sa ireducibilnim koreprezentacijama magnetne grupe $G \otimes \{e, \theta\}$. Stoga se za reprezentacije II i III vrste može uzeti realni ali ne i standardni svojstveni bazis u $\mathcal{H}_q^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_q^{(\mu^* t_{\mu^*})}$ za W , a zatim kanoničnošću dopuniti i bazisom u $\mathcal{H}_p^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu^* t_{\mu^*})}$:

$$\begin{aligned} |\mathbf{Q}, \mu t_\mu m, r\rangle &= \frac{|\mathbf{Q}, \mu t_\mu m\rangle + |\mathbf{Q}, \mu^* t_{\mu^*} m\rangle}{\sqrt{2}}, & |\mathbf{Q}, \mu t_\mu m, i\rangle &= \frac{|\mathbf{Q}, \mu t_\mu m\rangle - |\mathbf{Q}, \mu^* t_{\mu^*} m\rangle}{-\sqrt{2}i}, \\ |\mathbf{P}, \mu t_\mu m, r\rangle &= \frac{|\mathbf{P}, \mu t_\mu m\rangle + |\mathbf{P}, \mu^* t_{\mu^*} m\rangle}{\sqrt{2}}, & |\mathbf{P}, \mu t_\mu m, i\rangle &= \frac{|\mathbf{P}, \mu t_\mu m\rangle - |\mathbf{P}, \mu^* t_{\mu^*} m\rangle}{\sqrt{2}i}. \end{aligned} \quad (2.7)$$

U ovako definisanom bazisu vektori pomeranja su realni, i hamiltonijan je:

$$\begin{aligned} H &= \frac{1}{2} \sum_I \sum_{t_\mu m} (P_{\mu t_\mu m}^2 + \omega^2(\mu t_\mu) Q_{\mu t_\mu m}^2) + \frac{1}{2} \sum_{II, III} ' \sum_{t_\mu m} \sum_{l=r, i} (P_{\mu t_\mu ml}^2 + \omega^2(\mu t_\mu) Q_{\mu t_\mu ml}^2) = \\ &= \frac{\hbar}{2} \sum_I \sum_{t_\mu m} \omega(\mu t_\mu) (b_{\mu t_\mu m}^* b_{\mu t_\mu m} + b_{\mu t_\mu m} b_{\mu t_\mu m}^*) + \frac{\hbar}{2} \sum_{II, III} ' \sum_{t_\mu ml} \omega(\mu t_\mu) (b_{\mu t_\mu ml}^* b_{\mu t_\mu ml} + b_{\mu t_\mu ml} b_{\mu t_\mu ml}^*) \end{aligned}$$

(oznakom \sum' istaknuto je da se sumira po polovini skupa kompleksnih reprezentacija – II i III vrste). Drugi izraz je u bazisu $\{|\mathbf{b}, \mu t_\mu m\rangle, |\mathbf{b}^*, \mu t_\mu m\rangle\}$ za realne, odnosno $\{|\mathbf{b}, \mu t_\mu m, r\rangle, |\mathbf{b}^*, \mu t_\mu m, r\rangle, |\mathbf{b}, \mu t_\mu m, i\rangle, |\mathbf{b}^*, \mu t_\mu m, i\rangle\}$ kod kompleksnih reprezentacija. Treba uočiti da kod kompleksnih reprezentacija vektori sa indeksom r (ili i) ne obrazuju ireducibilni potprostor, te bazis nije standardni. Međutim, koordinate $b_{\mu t_\mu m, r}$, $b_{\mu t_\mu m, r}^*$ (isto za i) zadovoljavaju bozonske komutacione relacije.

Zbog kontragredijentnosti reprezentovanja u impulsnom i konfiguracionom prostoru, koordinate u bazu tipa (2.6), formirane direktno od vektora standardnog bazisa, ne bi imale ni odgovarajuće simetrijske osobine, niti bi zadovoljavale bozonske relacije. Stoga se za kompleksne reprezentacije uvodi u $\mathcal{H}_q^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_q^{(\mu^* t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu t_\mu)} \oplus \mathcal{H}_p^{(\mu^* t_\mu)}$ bazis:

$$\begin{aligned}
\{ | \mathbf{b}, \mu t_\mu m \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}} | \mathbf{Q}, \mu t_\mu m \rangle - \imath \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}} | \mathbf{P}, \mu^* t_\mu m \rangle, \\
| \mathbf{b}^*, \mu t_\mu m \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}} | \mathbf{Q}, \mu^* t_\mu m \rangle + \imath \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}} | \mathbf{P}, \mu t_\mu m \rangle, \\
| \mathbf{b}, \mu^* t_\mu m \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}} | \mathbf{Q}, \mu^* t_\mu m \rangle - \imath \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}} | \mathbf{P}, \mu t_\mu m \rangle, \\
| \mathbf{b}^*, \mu^* t_\mu m \rangle &= \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}} | \mathbf{Q}, \mu t_\mu m \rangle + \imath \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}} | \mathbf{P}, \mu^* t_\mu m \rangle \}.
\end{aligned} \tag{2.8}$$

Tek u koordinatama bazisa (2.8), hamiltonijan dobija formu (2.5) (uz promenjeni sadržaj oznaka):

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mu t_\mu m} \hbar\omega(\mu t_\mu) (b_{\mu t_\mu m}^* b_{\mu t_\mu m} + b_{\mu t_\mu m} b_{\mu t_\mu m}^*).$$

Pošto je $Q_{\mu t_\mu m} = \sqrt{\frac{\hbar}{2\omega(\mu t_\mu)}} (b_{\mu t_\mu m} + b_{\mu^* t_\mu m}^*)$ i $P_{\mu t_\mu m} = \imath \sqrt{\frac{\hbar\omega(\mu t_\mu)}{2}} (b_{\mu t_\mu m}^* - b_{\mu^* t_\mu m})$, lako se proveravaju bozonske komutacione relacije. Vidi se da se kompleksno konjugovane koordinate transformišu po konjugovanim reprezentacijama, te nije moguće razdvojiti konjugovane ireducibilne potprostore. Konačno, dok kreacioni operatori u prethodnom hamiltonijanu povezuju različite ireducibilne reprezentacije, u poslednjem indukuju kompleksne pomeraje. Zbog korišćenja ovakvih koordinata u tzv. kanoničnom kvantovanju, govori se o nesaglasnosti simetričnih koordinata i kanoničnog kvantovanja.

Niz svojstava dinamičke reprezentacije čini da je jedan od najznačajnijih koraka u ovom postupku, njeno nalaženje i redukcija, iznenađujuće jednostavan. Pre svega, matrice $D^d(g)$ mogu imati nenulte elemente samo na mestima koja povezuju atome iste vrste (inače ne bi održavale sistem nepromenjenim), a dijagonalni elementi su im različiti od nule samo za atome koji ostaju nepokretni pri datoj operaciji. Preciznije, $D_{\alpha\beta}^P(g) = \delta_{\beta,g\alpha}$ pa se u izrazu za redukciju $D^d(G) = \sum_\mu a_\mu D^{(\mu)}(G)$ nalazi:

$$a_\mu = \frac{1}{|G|} \sum_g \chi^{(\mu)*}(g) \chi^d(g), \quad \chi^d(g) = n(g) \chi^v(g).$$

$n(g) = \chi^P(g)$ je broj atoma nepokretnih pri transformaciji g , a $\chi^v(g)$ je karakter polarno-vektorske reprezentacije koji se lako izračunava. Za translacije je $\chi^v(I|\mathbf{z}) = 3$, jer ne menjaju vektore. Kod rotacije za ugao φ je $\chi^v(R(\varphi)) = 1 + 2 \cos(\varphi)$, a za proizvod inverzije i rotacije je $\chi^v(PR(\varphi)) = -1 - 2 \cos(\varphi)$. Očigledno, ako transformacija g nema nepokretnih tačaka u \mathbb{R}^3 , ona pomera sve atome, pa je $\chi^d(g) = n(g) = 0$. Tako, za $R\mathbf{t} = \mathbf{t}$ element $(R|\mathbf{t})$ sadrži i translaciono dejstvo, i nezavisno od razmatranog sistema je $\chi^d(R|\mathbf{t}) = 0$ (nenultost vektora \mathbf{t} ne obezbeđuje translaciono delovanje celog elementa: npr. za $\mathbf{t} = t\mathbf{e}_z$ i $R = \sigma_h$, kada je $R\mathbf{t} = -\mathbf{t}$, ceo element $(\sigma_h|t\mathbf{e}_z)$ je refleksija u horizontalnoj ravni $z = \frac{t}{2}$).

Drugo važno svojstvo dinamičke reprezentacije je posledica disjunktnosti orbita dejstva grupe G na datom sistemu. Potprostor dobijen kao konfiguracioni (ili fazni) prostor orbite je invarijantni potprostor celog konfiguracionog (faznog) prostora. Stoga se dinamička reprezentacija redukuje u potprostorima orbita, te predstavlja zbir dinamičkih reprezentacija orbita sistema (svojstvo nasleđeno od permutacione $D^P(G)$). Izvedeni zaključak inspiriše nalaženje svih neekvivalentnih orbita u \mathbb{R}^3 određene grupe, te razmatranje vibracija proizvoljnih sistema te simetrije.

Dinamička reprezentacija opisuje sva odstupanja sistema od ravnotežnog položaja: vibracije, translacije i rotacije. Translacije i rotacije opisuju kretanja sistema kao celine (npr. kretanje centra masa), te ih treba izdvojiti da bi se posmatrali samo unutrašnji stepeni slobode. Pomeranja nastala translacijama, odnosno rotacijama transformišu se po polarno- i aksijalno-vektorskoj reprezentaciji, te se dozvoljene translacione, odnosno rotacione mode transformišu po odgovarajućim ireducibilnim komponentama ovih reprezentacija, i te komponente treba izostaviti iz dinamičke reprezentacije da bi preostale mode opisivale vibracije. Kod beskonačnih sistema rotacione mode se ne mogu pojaviti (jer na dovoljnoj udaljenosti od ose rotacije to ne bi bila mala odstupanja od ravnotežnog položaja), osim kod kvazi-jednodimenzionalnih (ali ne linearnih) sistema, kada postoji moda rotacije oko ose sistema. Pri rešavanju svojstvenog problema dinamičke matrice izolovanog sistema, dozvoljene translacione i rotacione mode se prepoznaju po nultim frekvencijama, jer tada hamiltonijan harmonijskog oscilatora opisuje takva kretanja.

2.1.3 Normalne mode kod kristala

Da bi se kod kristala primenio metod opisan u prethodnom poglavlju, potrebno je neke oznake prilagoditi konkretnoj situaciji. Tako će indeks atoma α biti zamenjen dvostrukim indeksom $\mathbf{z}\alpha$, gde prvi deo oznake ukazuje u kojoj elementarnoj ćeliji se nalazi posmatrani atom α . \mathbf{z} je vektor sa koordinatama $z_i = 0, \dots, N_i - 1$, a $\alpha = 1, \dots, r$ prebrojava r atoma u ćeliji. Vidi se da je ukupan broj atoma $n = Nr$, (Ukupan broj atoma kod kristala je, naravno, beskonačan, ali se može samo formalno uvesti broj atoma zbog normiranja vektora, dok konačni rezultati ne zavise od broja atoma.) gde je $N = N_1 N_2 N_3$. Bazis (2.3) postaje $|\mathbf{Q}, \mathbf{z}\alpha i\rangle$, i dinamička reprezentacija je definisana sa:

$$D^d(I|\mathbf{1})|\mathbf{Q}, \mathbf{z}\alpha i\rangle = |\mathbf{Q}, (\mathbf{1} + \mathbf{z})\alpha i\rangle.$$

Matrice i karakteri reprezentacije su:

$$D^{d\mathbf{z}\alpha i}_{\mathbf{z}'\alpha' i'}(I|\mathbf{1}) = \delta_{\mathbf{z}' + \mathbf{1}}^{\mathbf{z}} \delta_{\alpha'}^{\alpha} \delta_{i'}^i \quad \chi^d(I|\mathbf{1}) = 3Nr\delta_{1,0}, \quad (2.9)$$

pa je razlaganje na ireducibilne komponente:

$$D^d(T) = \sum_{\mathbf{k}} 3r D^{(\mathbf{k})}(T).$$

Sledi da su svi potprostori $\mathcal{H}_q^{(\mathbf{k})}$ $3r$ -dimenzionalni (indeks m je nepotreban, jer su sve ireducibilne reprezentacije jednodimenzionalne). Lako je proveriti da su vektori

$$\{|\mathbf{Q}, \mathbf{k}\alpha i\rangle = \sqrt{N}P^{(\mathbf{k})}|\mathbf{Q}, 0\alpha i\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{z}} e^{i\mathbf{kz}} |\mathbf{Q}, \mathbf{z}\alpha i\rangle \mid \alpha = 1, \dots, r; i = 1, 2, 3\}$$

ortonormirani, te čine bazis u $\mathcal{H}_q^{(\mathbf{k})}$. Zbog translacione simetrije sistema $D^d(T)$ komutira sa V i W . Na osnovu toga se iz (2.9) nalazi $W_{z'\alpha'i'}^{z\alpha i} = W_{0\alpha'i'}^{z-z'\alpha i}$. U gornjem bazisu W je u redukovanoj formi. Naime, kako je $\langle \mathbf{Q}, \mathbf{k}\alpha i | W | \mathbf{Q}, \mathbf{k}'\alpha'i' \rangle = \sum_{\mathbf{z}} e^{-i\mathbf{kz}} W_{0\alpha'i'}^{z\alpha i} \delta_{\mathbf{k}'}$, u $\mathcal{H}_q^{(\mathbf{k})}$ se W redukuje u: $W_{\alpha'i'}^{\alpha i}(\mathbf{k}) = \sum_{\mathbf{z}} e^{-i\mathbf{kz}} W_{0\alpha'i'}^{z\alpha i}$.

Rešavanjem svojstvenog problema se nalaze svojstvene vrednosti $\omega_t^2(\mathbf{k})$ (uočava se da je $\omega_t(\mathbf{k}) = \omega_t(-\mathbf{k})$, jer je $W(\mathbf{k}) = W^*(\mathbf{k})$) i standardni svojstveni bazis $\{ | \mathbf{Q}, \mathbf{k}t \rangle | \mathbf{k} \in BZ, t = 1, \dots, 3r \}$ (t nije potrebno indeksirati jer uvek uzima istih $3r$ vrednosti). U koordinatama ovog bazisa hamiltonijan je:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}t} (P_{\mathbf{k}t}^* P_{\mathbf{k}t} + \omega_t^2(\mathbf{k}) Q_{\mathbf{k}t}^* Q_{\mathbf{k}t}).$$

Da bi se ovaj oblik sveo na sistem harmonijskih oscilatora, koriste se ranije opisani metodi za reprezentacije III vrste: ili se u realnom bazisu (2.7) nalazi

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_t \sum_{l=r,i} (P_{\mathbf{k}tl}^2 + \omega_t^2(\mathbf{k}) Q_{\mathbf{k}tl}^2) = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k} \in \frac{BZ}{2}} \sum_t \sum_{l=r,i} \omega_t(\mathbf{k}) (b_{\mathbf{k}tl}^* b_{\mathbf{k}tl} + b_{\mathbf{k}tl} b_{\mathbf{k}tl}^*),$$

ili, češće, u bazisu (2.8) smenom $Q_{\mathbf{k}t} = \frac{1}{\sqrt{2\omega_t(\mathbf{k})}} (b_{\mathbf{k}t} + b_{-\mathbf{k}t}^*)$, $P_{\mathbf{k}t} = i\sqrt{\frac{\omega_t(\mathbf{k})}{2}} (b_{\mathbf{k}t}^* - b_{-\mathbf{k}t})$, prelazi na hamiltonijan

$$H = \frac{1}{2} \sum_{\mathbf{k}t} \omega_t(\mathbf{k}) (b_{\mathbf{k}t}^* b_{\mathbf{k}t} + b_{\mathbf{k}t} b_{\mathbf{k}t}^*).$$

Prilikom kvantizacije, u fizici čvrstog stanja poslednji izraz opisuje energiju termalnih pobuđenja rešetke, odnosno kvazi-čestice, *fonone*, kreirane operatorima $b_{\mathbf{k}t}^\dagger$.

Iz čisto fizičkih razloga je jasno da se pri maloj promeni \mathbf{k} mora očekivati neprekidna promena svojstvenih frekvencija $\omega_t(\mathbf{k})$, čime se za fiksirano t dobijaju krive (hiperpovrši) zavisnosti ω_t nad *Brillouin*-ovom zonom, tzv. vibracione grane. One su manifestacija translacione simetrije, odnosno specijalan slučaj energijskih zona, . Već je napomenuto da kod kristala postoje 3 translacione mode, koje se transformišu po jediničnoj reprezentaciji $\mathbf{k} = 0$ (razmatra se samo translaciona grupa), pae je frekvencija $\omega = 0$ trostruko degenerisana. One tri grane $\omega_t(\mathbf{k})$ ($t = 1, 2, 3$) koje u centru *Brillouin*ove zone imaju $\omega_t(0) = 0$ nazivaju se akustičkim granama, a ostale ($t = 4, \dots, 3r$) optičkim granama. Naime, za $\mathbf{k} = 0$ kod svih ćelija kristala se vrši isti poremećaj, ali kod akustičkih moda unutar ćelije nema poremećaja, ćelija se pomera kao celina (odlika translacija) kao kod zvučnih talasa, dok je kod optičkih grana pomeranje ćelije praćeno i vibracijama atoma unutar nje. Jasno je već iz ovih razmatranja, da bi u slučaju korišćenja cele prostorne grupe kristala, indeks t bio povezan sa ireducibilnim reprezentacijama grupe simetrije ćelije (naravno, posredno, preko indukovanih reprezentacija prostorne grupe).

Prethodno opisani metod se lako uopštava na druge fizičke probleme. Ako se tada menja samo unutrašnji prostor, onda se, zavisno od problema, umesto \mathbb{R}^3 kod mehaničkih kretanja, može svakom atomu pridružiti neki drugi prostor, \mathcal{H}_{in} . To povlači i promenu reprezentacije grupe simetrije: analogon polarno vektorske reprezentacije postaje reprezentacija $D^{in}(G)$ u \mathcal{H}_{in} , dok je permutaciona reprezentacija nepromenjena. Dobijene normalne mode sistema se takođe mogu prepoznati kao kvazičestična pobuđenja. Naravno, smisao kvazičestica zavisi od konkretnog sistema.

2.2 Klasifikacija normalnih moda diperiodičnih sistema

Kao što je rečeno u odeljku 2.1.3, dinamička reprezentacija kristala je direktan proizvod permutacione reprezentacije i polarno vektorske reprezentacije (ukoliko se traži klasifikacija normalnih moda). Permutaciona reprezentacija predstavlja reprezentaciju permutacija atoma iste vrste. Pošto je dinamička reprezentacija za celu grupu jednaka zbiru dinamičkih reprezentacija za svaku od orbita, dovoljno je naći razlaganje dinamičke reprezentacije za svaku od orbita. Svaki realan kristal se sastoji od celih orbita grupe B.1, tako da, za određenu grupu, poznavanje razlaganja za svaku od orbita daje razlaganje dinamičke reprezentacije za svaki realan kristal sa datom grupom simetrije. Zbog translacione simetrije diperiodični sistemi su beskonačni, te stoga ne postoje rotacione mode 2.1. Vibracione mode se dobijaju odbacivanjem translacionih moda od svih dobijenih, što se postiže oduzimanjem razlaganja polarno vektorske reprezentacije od razlaganja dinamičke reprezentacije, za svaku orbitu.

Činjenica da su diperiodični sistemi beskonačni, a samim tim im je i dinamička reprezentacija beskonačno dimenzionalna (zbog permutacione reprezentacije koja opisuje permutacije svih atoma istog tipa, kojih ima beskonačno mnogo), na prvi pogled onemogućava tačno razlaganje dinamičke reprezentacije. Ovaj problem se može prevazići na dva načina: uvođenjem periodičnih graničnih uslova (*Born-von Karman*-ovi granični uslovi), čime se praktično dobija konačan sistem, ili korišćenjem metode modifikovanih grupnih projektora [10]. Prvi metod nije sasvim pogodan za klasifikaciju normalnih moda (mada je vrlo koristan u mnogim problemima fizike čvrstog stanja) zbog toga što se može desiti da se korišćenjem periodičnih graničnih uslova, u razlaganju dinamičke reprezentacije pojave frekvencije (brojevi pojavljivanja pojedinih ireducibilnih reprezentacija u razlaganju dinamičke reprezentacije) koje nisu prirodni brojevi, ili nula, već se dobijaju racionalni brojevi, što je potpuno apsurdan rezultat, koji, često, nije moguće ispraviti promenom samih uslova. Sa druge strane i uz korišćenje periodičnih graničnih uslova dinamičke reprezentacije su i dalje prilično velikih dimenzija, što umnogome utiče na vreme potrebno za račun. Zbog svega upravo navedenog u ovom radu je korišćen, za ovakav račun superioran, metod modifikovanih grupnih projektora, koji radi sa konačnim podgrupama diperiodičnih grupa, te su samim tim i dimenzije matrica sa kojima se barata sasvim prihvatljivih dimenzija.

2.2.1 Modifikovani grupni projektori — osnovne ideje

Neka je H neka, konačna, podgrupa grupe G . Neka je, dalje, $D(G)$ neka reprezentacija grupe G dobijena indukcijom sa podgrupe H , $D(G) = \Delta(H \uparrow G)$. Mogu se definisati matrice: $\Gamma^\mu = D(G) \otimes D^{(\mu)*}(G)$, gde je $D^{(\mu)}(G)$ neka ireducibilna reprezentacija grupe G ; i $\gamma^\mu(H) = \Delta(H) \otimes D^{(\mu)*}(G \downarrow H)$, gde je $D^{(\mu)}(G \downarrow H)$ reprezentacija grupe G subdukovana na podgrupu H . Dalje se mogu definisati grupni projektori na potprostore za svojstvene vrednosti jednake jedinici, za obe gore pomenute matrice: $P_G(\Gamma^\mu)$ i $P_H(\gamma^\mu)$. Pokazano je da postoji vrlo jednostavna veza između ova dva projektora, naime postoji parcijalna izometrija B^μ , takva da važi $P_G(\Gamma^\mu) = B^{\mu\dagger} P_H(\gamma^\mu) B^\mu$. Trag desne strane je upravo broj pojavljivanja μ -te reprezentacije u razlaganju reprezentacije $D(G)$, dok je to sa druge strane jednako tragu projektora $P_H(\gamma^\mu)$:

$$\text{Tr}(P_G(\Gamma^\mu)) = \text{Tr}(P_H(\gamma^\mu)), \quad (2.10)$$

zbog invarijantnosti traga na ciklične promene mesta matrica. Upravo ovaj teorem omogućava jednostavno razlaganje dinamičke matrice, bez korišćenja periodičnih graničnih uslova, i bez matrica velikih dimenzija. Naime reprezentacija $D(G)$ može biti bilo koja reprezentacija grupe

G čije se razlaganje traži, sa druge strane H može biti bilo koja konačna podgrupa grupe G . Za razliku od primene ovog metoda na linijske grupe, gde je kao konačna podgrupa korišćena monomerska grupa (grupa simetrije monomera, osnovnog gradivnog elementa polimera), u ovom radu je za konačnu podgrupu uzeta *mala grupa* orbite. Mala grupa neke orbite sadrži one elemente grupe koji ostavljaju nepokretnim (invarijantnim) svaku tačku orbite. Iz definicije male grupe je jasno da je dinamička reprezentacija neke orbite subdukovana na malu grupu date orbite, samo polarno-vektorska reprezentacija zbog toga što je permutaciona reprezentacija u tom slučaju jednaka jediničnoj matrici.

Procedura razlaganja dinamičke reprezentacije, za svaku orbitu, u ovom radu sadrži: subdukciju polarno vektorske reprezentacije na malu grupu orbite, što predstavlja reprezentaciju $\Delta(H)$ iz teorema, zatim se ireducibilne rerepresentacije grupe subdukuju na malu grupu orbite; dalje se direktno množe $\Delta(H)$ i svaka, konjugovana, subdukovana ireducibilna reprezentacija, te se nalazi grupni projektor ovog proizvoda, za svojstvenu vrednost jedan. Trag ovog projektora je, po teoremu, jednak broju pojavljivanja μ -te ireducibilne reprezentacije u razlaganju dinamičke reprezentacije za datu orbitu. Zatim se od razlaganja dinamičke reprezentacije može oduzeti razlaganje polarno vektorske reprezentacije, da bi se dobilo razlaganje vibracione reprezentacije, odnosno da bi se dobila klasifikacija normalnih moda. Razlaganja polarno-vektorskih reprezentacija i dinamičkih reprezentacija za pojedine diperiodične grupe su data u dodatku [D.1](#).

Glava 3

Jahn-Teller-ov efekat

3.1 Klasična teorija

Pri opisivanju složenih fizičkih sistema, tehnička (računska) nemogućnost da se dobijene jednačine tačno reše, obično se prevazilazi različitim aproksimacijama. Za razliku od aproksimacija vezanih za konkretne probleme, adijabatska aproksimacija je jedno od opštih mesta fizike.

Kad god se uoči da se sistem sastoji od dva podsistema, pri čemu jedan od njih ("laki"), prati promene drugog ("teški"), prvo se razmatra problem "lakog" podsistema, tako što se eksplicitno, kroz potencijal, ugrađuje zavisnost od stanja "teškog" podsistema. Pri fiksiranom stanju $|x\rangle$ "teškog", ovo je potencijal $V_{|x\rangle}$ "lakog" podsistema. Njegove minimalne tačke su stabilna stanja "lakog" podsistema za zadato stanje "teškog", i time funkcija stanja "teškog" podsistema. Aproksimacija se sastoji u tome da se ukupna evolucija izmeni tako da se pri kretanju "teškog" podsistema ne narušava stabilnost "lakog": izbacuju se oni članovi koji u okolini $|x\rangle$ mogu dovesti do prelaska iz minimuma potencijala $V_{|x\rangle}$ u neku neminimalnu tačku potencijala $V_{|x'\rangle}$. Drugim rečima, "lakisistem se pri promeni "teškog" trenutno stabilizuje.

Prostor stanja je $\mathcal{H} = \mathcal{H}_L \otimes \mathcal{H}_T$. Evolucija je određena ukupnim potencijalom (invarijantni funkcional na celom prostoru):

$$V(|x\rangle, |y\rangle) = V_L(|y\rangle) + V_T(|x\rangle) + V_{LT}(|x\rangle, |y\rangle),$$

gde je $V_{LT}(|x\rangle, |y\rangle)$ potencijal interakcije, dok su $V_T(|x\rangle)$ i $V_L(|y\rangle)$ potencijali izolovanih podsistema. Grupa simetrije sistema je G (presek simetrija potencijala). Delovanje grupe je dato direktnim proizvodom podsistemskih reprezentacija: $D(G) = D_L(G) \otimes D_T(G)$.

Adijabatičnost pretpostavlja da dinamiku "lakog" sistema određuje potencijal $V(|x_1\rangle, |y\rangle)$, koji je, za fiksirano $|x_1\rangle$ funkcional na \mathcal{H}_L . Neka je $|y_1, \nu t_\nu\rangle \in \mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$ jedna tačka minimuma. Cela njena orbita se sastoji od ekvivalentnih minimuma, i oni, zbog ireducibilnosti reprezentacije $D^{(\nu)}(G)$, obrazuju $\mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$. Sada je jasno da aproksimacija zanemaruje dinamiku koja pri promeni stanja "teškog" podsistema izvodi "laki" iz $\mathcal{H}_L^{(\nu t_\nu)}$. Stoga su važna samo odstupanja od $|y_1, \nu t_\nu\rangle$ unutar ovog potprostora, tj. pri kretanju "teškog" podsistema $|x_1\rangle + \geq |x, \mu t_\mu\rangle$ novo stabilno stanje "lakog" podsistema je oblika $|y_1, \nu t_\nu\rangle + \eta \sum_n \eta_{\nu t_\nu n} | \nu t_\nu n \rangle$. Kako je "laki" podsistem, zbog adijabatičnosti stalno u stabilnom stanju, važi

$$V(|x_1\rangle + \geq |x, \mu t_\mu\rangle, |y_1, \nu t_\nu\rangle + \eta \sum_n \eta_{\nu t_\nu n} | \nu t_\nu n \rangle) =$$

$$V(|x_1\rangle, |y_1, \nu t_\nu\rangle) + \eta^2 \sum_{nn'} C_{nn'}(\geq) \eta_{\nu t_\nu n} \eta_{\nu t_\nu n'} + \dots$$

Stabilnost "teškog" podsistema je uslovljena naknadnim razvojem po \geq , pa se za vodeći član iz prethodne jednakosti nalazi $\eta^2 \geq \sum_{nn'm} C_{nn'm} \eta_{\nu t_\nu n} \eta_{\nu t_\nu n'} \xi_{\mu t_\mu m}$. Polinom linearan po \geq se transformiše po reprezentaciji $[D^{(\nu)^2}(G)] \otimes D^{(\mu)}(G)$. Stoga je sistem nestabilan za odstupanja "teškog" podsistema u pravcu $\mathcal{H}_T^{(\mu)}$, ako postoji invarijantni polinom linearan po $\xi_{\mu t_\mu m}$ i kvadratan po $\eta_{\nu t_\nu n}$, tj. ako navedeni proizvod reprezentacija sadrži jediničnu reprezentaciju. Dakle, ako se $D^{(\mu)}(G)$ sadrži u $[D^{(\nu)^2}(G)]$ (uslov ekvivalentan prethodnom zbog realnosti reprezentacija), "teški" sistem će preći u stanje niže simetrije. Ukoliko je $D^{(\nu)}$ jednodimenzionalna (tj. "laki" sistem je u nedegenerisanom stanju), simetrični kvadrat je jedinična reprezentacija, te su moguća odstupanja samo u pravcu nepokretnih tačaka u \mathcal{H}_T , dakle, bez narušenja simetrije.

U prethodnom izrazu μ je bilo koja iz reprezentacija u razvoju $D_T(G)$, a ν neka od ireducibilnih komponenti $D_L(G)$. Sistem je adijabatski nestabilan ako u simetričnom kvadratu svake ireducibilne reprezentacije njegove grupe simetrije postoji bar jedna nejedinična ireducibilna komponenta $D_T(G)$. Ako je "teški" podsistem adijabatski nestabilan, ma kakav bio "laki" podsistem, simetrija G "teškog" narušava čim je "laki" degenerisan. Međutim, i u novom stanju, cela procedura bi se mogla ponoviti, samo bi se umesto G razmatrala grupa $G_{|x, \mu t_\mu\rangle}$, odgovarajući epikernel za $D^{(\mu)}$, i njene reprezentacije. Ako uslov adijabatske nestabilnosti važi i za epikernele, njihove epikernele itd., simetrija se narušava sve dok "laki" sistem ne pređe u stanje jednodimenzionalne reprezentacije aktuelne grupe simetrije "teškog" sistema, tj. dok se ne izgubi degeneracija "lakog" podsistema.

Razmatranje potencijala "lakog" sistema u slojevima, $V(|x_1\rangle, |y\rangle)$, ne predstavlja aproksimaciju, već samo prilagođavanje budućoj aproksimaciji. S druge strane, zabrana napuštanja pojedinih ireducibilnih potprostora u \mathcal{H}_L jeste aproksimacija. Opravdanost aproksimacije zavisi od problema, odnosno od odnosa masa elemenata lakog i teškog sistema.

Sledeći ideju Lava Landaua [11], Jahn i Teller su pokazali [12] da su nelinearni molekuli vibraciono nestabilni u degenerisanim elektronskim stanjima (pri tome se ne računa Kramersova degeneracija, vezana za nelinearno reprezentovanu vremensku inverziju. Naime, pokazali su da simetrični kvadrat svake fizički ireducibilne višedimenzionalne reprezentacije svake tačkaste grupe konačnog reda sadrži neku od ireducibilnih komponenti vibracione reprezentacije molekula sa takvom simetrijom. Jasno je da joni uzimaju ulogu "teškog" sistema, a elektroni "lakog", te je $D_T(G)$ dinamička reprezentacija jonskog sistema. Translacione i rotacione mode se ne razmatraju, jer je ukupni sistem izolovan, tj. invarijantni funkcional je konstantan duž pravaca ovakvih pomeranja, te odgovarajući članovi odsustvuju u prvom, kao i ostalim stepenima razvoja, i ne mogu dovesti do nestabilnosti. To znači da kod molekula uvek postoji neka vibraciona (ne translaciona ili rotaciona) nesimetrična (odgovara nejediničnoj reprezentaciji) normalna moda, koja će se u ukupnom potencijalu pojaviti u prvom stepenu razvoja, i samim tim destabilizovati jone u molekulu, menjajući im relativni položaj uz smanjivanje simetrije. Kako je epikernel tačkaste grupe opet tačkasta grupa, dolazi do opisanog narušenja simetrije sve do potpunog cepanja elektronskih nivoa na nedegenerisane: tek tada nastaje stabilno stanje molekula. Isto svojstvo je pokazano za linijske grupe [4], odnosno polimere, dok su za ostale beskonačne sisteme (uključujući kristale) postojale samo pojedinačne, pre svega eksperimentalne potvrde [13]. Iako je naglašeno da je reč o aproksimativnom tretmanu, odnos masa elektrona i jona čini izvedene zaključke praktično tačnim, a eksperimentalno su lako uočljivi.

Glava 4

Rezultati

4.1 Klasifikacija normalnih moda diperiodičnih sistema

Sledeći standardnu proceduru, opisanu u poglavlju 2, klasifikovane su normalne mode za sve diperiodične sisteme, odnosno nađeno je razlaganje dinamičkih reprezentacija svake orbite, za svaku diperiodičnu grupu. Rezultati, zbog obimnosti, za pojedine diperiodične grupe, uz detaljna uputstva za čitanje tabela su dati u dodatku D.1. Činjenica da je svaki realan kristal sastavljen od nekoliko orbita date diperiodične grupe znači da klasifikacija normalnih moda za svaku orbitu, svake diperiodične grupe, uistinu predstavlja klasifikaciju normalnih moda za svaki realan diperiodičan sistem. Klasifikacija normalnih moda je urađena pomoću metode modifikovanih grupnih projektora, kao što je opisano u odeljku 2.10, u kome je kao konačna podgrupa uzeta mala grupa orbite.

4.2 *Jahn-Teller-ov* efekat u diperiodičnim sistemima

Da bi se ispitao *Jahn-Teller-ov* teorem, odnosno da bi se analizirala elektron-fonon interakcija u okviru adijabatske aproksimacije, bilo je potrebno da se osim razlaganja vibracione reprezentacije (koja klasifikuje normalne mode, odnosno fonone), nađe i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija, kao što je objašnjeno u odeljku 3. Razlaganje simetrizovanih kvadrata se obično vrši uz pomoć tehnike grupnih projektora, ali zbog tehničkih karakteristika računara na kojima je ovaj rad urađen, kao i zbog velikih dimenzija matrica simetrizovanih kvadrata, bilo je potrebno osmisliti neki alternativni metod koji bi mogao da da tačne rezultate, za razumno vreme. U tom cilju korišćeno je razlaganje preko karaktera reprezentacija, što je detaljno objašnjeno u dodatku C.2. Rezultati su dati u tabelama u dodatku D.1. Poznavanje razlaganja vibracione reprezentacije i razlaganja simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija je neophodan uslov za ispitivanje *Jahn-Teller-ovog* teorema.

Još su *Jahn* i *Teller* pokazali da u molekulima uvek postoje takve normalne mode, koje će, ukoliko se elektroni nalaze u degenerisanom stanju, izazvati takvu deformaciju rešetke da posle promene strukture, elektroni budu u nedegenerisanom stanju. Drugim rečima, razlaganje vibracione reprezentacije i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija imaju zajedničke komponente, ili na treći način rečeno, direktni proizvod vibracione reprezentacije i simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija sadrži jediničnu reprezentaciju 3. Takođe je pokazano da je i kod monoperioidičnih sistema, opisanih linijskim grupama, ispunjen *Jahn-Teller-ov* teorem. Verovalo se da je teorem generalan, samo što do sada nije dokazano da

li je ispunjen za diperioidične i prostorne grupe, mada su mnogi eksperimentalni rezultati potvrđivali ispunjenost teorema. Imajući razlaganje vibracionih reprezentacija i razlaganje simetrizovanih kvadrata, bilo je sasvim prirodno ispitati postojanje *Jahn-Teller*-ovog efekta. Za razliku od molekula (tačkaste grupe) i polimera (linijske grupe), kod diperioidičnih grupa je prvi put konstatovano odsustvo *Jahn-Teller*-ovog efekta za neke orbite visokosimetričnih diperioidičnih grupa (heksagonalnih i tetragonalnih). Ovi rezultati su pažljivo testirani upravo zbog ekskluzivnosti i neočekivanosti ovakvih rezultata.

4.3 Ostali rezultati

Da bi se dobili navedeni osnovni rezultati ovog rada, bilo je potrebno razviti niz pomoćnih tehnika kako bi se ubrzao i olakšao osnovni račun. Sa tim ciljem je razvijena tehnika razlaganja simetrizovanih kvadrata preko karaktera reprezentacija (dodatak C.2), koja se uz malu modifikaciju može primeniti i na nalaženje *Clebsch-Gordan* serija, zatim nađene su sve orbite diperioidičnih grupa (dodatak B), čime su provereni rezultati dati i radu [1]. Razvijen je program za razlaganje dinamičkih reprezentacija, koji se, bez modifikacija može primeniti i za klasifikaciju magnonskih zona, ili bilo koje druge reprezentacije, kao što je objašnjeno u odeljku 2.1.

4.4 Narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema

Kao što je rečeno u odeljku 4.2, kod diperioidičnih grupa je prvi put primećeno narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema. Drugim rečima, mogu da postoje takvi diperioidični kristali kod kojih bi elektroni mogli da budu u degenerisanim stanjima, a ne bi postajala ineterakcija sa fononima koja bi tu degeneraciju ukinula. Narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema se javlja kod visoko simetričnih diperioidičnih grupa, isključivo tetragonalnih i heksagonalnih. *Jahn-Teller*-ov teorem je ispunjen za sve monoklinične i ortorombične sistema. Ovaj rezultat će biti ilustrovan na nekoliko primera. Sasvim precizan iskaz narušenja *Jahn-Teller*-ovog teorema bi glasio: postoje orbite diperioidičnih grupa za koje elektroni u pojedinim elektronskim stanjima u nekim specijalnim tačkama *Brillouin*-ove zone ne interaguju sa fononima, u okviru adijabatske aproksimacije, odnosno ne postoji interakcija koja bi ukinula degeneraciju elektronskih stanja u pojedinim specijalnim tačkama *Brillouin*-ove zone.

Sama činjenica da razlaganje dinamičke reprezentacije, za određenu orbitu neke diperioidične grupe, i razlaganje simetrizovanog kvadrata određene ireducibilne reprezentacije iste grupe, nema zajedničkih komponenti ne mora da znači da je *Jahn-Teller*-ov teorem narušen. Naime *Jahn-Teller*-ov teorem, a i sama procedura provere, se odnosi isključivo na realne reprezentacije (fizički ireducibilne tj. prve vrste). Pored toga može da se desi da orbita kod koje je, naizgled, narušen teorem ima veću simetriju nego što je grupa simetrije, tako da je potrebno naći određujuće skupove orbita, koji će imati odgovarajuću simetriju, kao što je urađeno kod linijskih grupa [14]. Sve ove situacije su razmotrene u sledećim primerima.

4.4.1 Primer 1 – Dg_{16}

Iz tabele D.1 za grupu Dg_{16} se vidi da za orbite iz tabele 4.1 nema zajedničkih komponenti u razlaganju dinamičke reprezentacije i razlaganju simetrizovanih kvadrata reprezentacija iz tačke M (slika 1.3). Reprezentacije u tački M su realne (prve vrste), što bi, naizgled,

značilo da je teorem narušen. Međutim, ako se deluje celom grupom na predstavnika orbite $\{0, 0, 0\}$, dobija se rešetka koja ima simetriju $D_{2h}T^2$, što je, očigledno veća grupa simetrije od $\mathbf{Dg}16 = D_{1d}T'^2$. Naime ovako dobijena rešetka ima simetriju holodrije, i jasno je da zbog toga što je orbita u xy -ravni, grupa simetrije sadrži horizontalnu ravan refleksije, σ_h , dok je početna grupa ne sadrži. U ovakvim situacijama, kako je pokazano u slučaju linijskih grupa [14], treba odrediti određujući skup orbita, odnosno treba uzeti dovoljno različitih orbita takvih da sistem sastavljen od ovih orbita ima početnu simetriju. U ovom primeru se lako vidi da treba izabrati neku orbitu koja nije u xy -ravni. Postoje dve orbite van xy -ravni (tabela B.1), i može se uzeti, na primer, orbita tipa $\{x, 0, z\}$. Kada sa saberu razlaganja dinamičkih reprezentacija za orbite $\{0, 0, 0\}$ i $\{x, 0, z\}$, i to razlaganje uporedi sa razlaganjem simetrizovanih kvadrata reprezentacija iz tačke M , dobija se da je teorem ispunjen. Potpuno analogno razmatranje važi i za drugu problematičnu orbitu $\{1/2, 0, 0\}$.

Tabela 4.1: Moguće narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema. U prvoj koloni su date orbite za koje je narušen *Jahn-Teller*-ov teorem, u drugoj koloni je data oznaka reprezentacije (samim tim i pozicija u *Brillouin*-ovoj zoni) čije razlaganje simetrizovanih kvadrata nema zajedničke komponente sa razlaganjem vibracione reprezentacije, u trećoj koloni su date dimenzije reprezentacija u tim tačkama, dok su u poslednjoj koloni dati tipovi datih reprezentacija.

Orbita	Reps.	dim.	tip
$(1/2, 0, 0)$	M_m^\pm	2	1
$(0, 0, 0)$	M_m^\pm	2	1

4.4.2 Primer 2 – Dg18

U slučaju grupe $\mathbf{Dg}18$, ne postoje zajedničke komponente u razlaganju dinamičke reprezentacije i razlaganju simetrizovanih kvadrata reprezentacija iz tačke M D.2. Ireducibilne reprezentacije grupe u tački M su jednodimenzionalne, što bi na prvi pogled moglo da znači da se ne moraju uzimati u obzir prilikom provere teorema, zato što ne postoji degeneracija. Međutim, navedene reprezentacije su kompleksne (trećeg tipa), pa se stoga moraju naći odgovarajuće realne (dekompleksifikovane) reprezentacije, koje su dvostruko veće dimenzije, pa samim tim postaju relevantne za ispitivanje teorema. Da bi se našlo razlaganje simetrizovanih kvadrata dekompleksifikovanih reprezentacija nije potrebno ponavljati celu proceduru razlaganja, već je u najvećoj meri moguće iskoristiti postojeće rezultate, što je detaljnije objašnjeno u dodatku C.4.

U navedenom primeru, nakon dekompleksifikacije potrebno je sprovesti i proceduru iz prethodnog primera 4.4.1, posle čega se dobija da je teorem i za ovu grupu ispunjen.

4.4.3 Primer 3 – Suštinsko narušenje teorema

Postoje dve diperioidične grupe kod kojih je i pored razmatranja datih u odeljcima 4.4.1, 4.4.2 *Jahn-Teller*-ov teorem suštinski narušen. To su $\mathbf{Dg}61 = D_{4h}T^2$ i $\mathbf{Dg}80 = D_{6h}T^2$. Sve ireducibilne reprezentacije obe grupe su realne, odnosno prve vrste. Pored toga za ove dve grupe su odgovarajuće holodrije simetrije sistema, što drugim rečima znači da ne postoji orbita koja ima veću simetriju od grupe simetrije, tako da je svaka pojedinačna orbita ujedno

Tabela 4.2: Moguće narušenje *Jahn-Teller*-ovog efekta – Dg18.

Orbita	Reps.	dim.	tip
$(1/4, 1/4, 0)$	${}^v M_m^\pm$	1	3
$(1/4, -1/4, 0)$	${}^v M_m^\pm$	1	3

i određujuća. Na osnovu toga je jasno da je nepostojanje zajedničkih komponenti u razlaganju dinamičke reprezentacije i razlaganju simetrizovanih kvadrata nekih reprezentacija iz specijalnih tačaka zone suštinsko narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema.

Tabela 4.3: Narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema. U prvoj koloni su date orbite za koje je narušen *Jahn-Teller*-ov teorem, u drugoj koloni je data oznaka reprezentacije (samim tim i pozicija u *Brillouin*-ovoj zoni) čije razlaganje simetrizovanih kvadrata nema zajedničke komponente sa razlaganjem vibracione reprezentacije, u trećoj koloni su date dimenzije reprezentacija u tim tačkama, dok su u poslednjoj koloni dati tipovi datih reprezentacija.

Orbita	Reprezentacije	dimenzije	tip
$(1/2, 0, 0)$	Γ_1^\pm, M_1^\pm	2	1
$(1/2, 1/2, 0)$	$\Gamma_1^\pm, {}^v X_m^\pm, M_1^\pm$	2	1
$(0, 0, 0)$	$\Gamma_1^\pm, {}^v X_m^\pm, M_1^\pm$	2	1

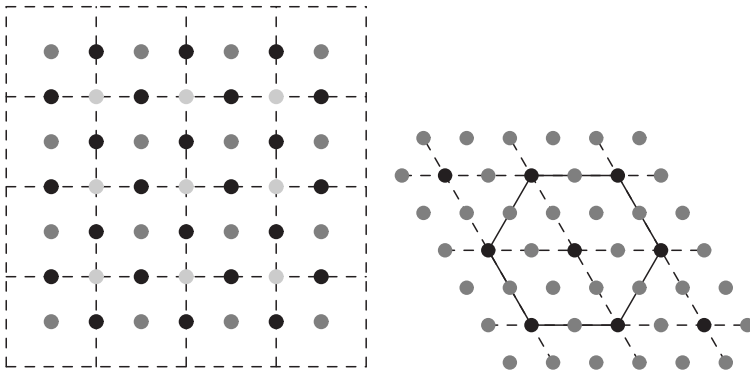
Tabela 4.4: Narušenje *Jahn-Teller*-ovog teorema: Dg80.

Orbita	Reprezentacije	dimenzije	tip
$(1/2, 0, 0)$	Γ_m^\pm	2	1
$(0, 0, 0)$	$\Gamma_m^\pm, {}^v Q_0^\pm$	2	1
$(0, 0, 0)$	${}^v X_m^\pm$	3	1

Za grupu **Dg61** rezultat je dat u tabeli 4.3. U tabelama 4.3, 4.4 se jasno vidi da se orbite, za koje je narušen *Jahn-Teller*-ov efekat, nalaze u ravni xy , ($z = 0$), što su i jedine orbite ove grupe koje se nalaze u xy ravni, to zapravo znači da svaki pojedinačni sloj sa tetragonalnom i heksagonalnom simetrijom (**Dg61**, **Dg80**) ima degenerisane elektronske nivoe u osnovnom stanju sistema. Na slikama 4.1 su dati najopštiji tipovi kristala koji bi imali ovakva svojstva. Zanimljivo je da je kod heksagonalnih sistema moguće i trostruko degenerisano osnovno stanje.

4.4.4 Simetrija bakar-oksodne ravni

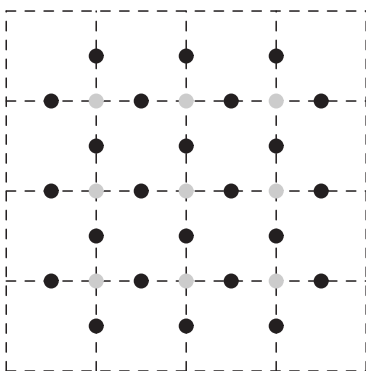
Jedan od najinteresantnijih sistema kod kojih nije, u potpunosti, ispunjen *Jahn-Teller*-ov teorem je bakar-oksidna ravan u visokotemperaturnim superprovodnicima. Bakar-oksidna



Slika 4.1: Na slici su nacrtane orbite koje narušavaju *Jahn-Teller-ov* teorem. Kružići različite boje (nijanse) predstavljaju različite atome.

(CuO) ravan se nalazi u većini visokotemperaturnih superprovodnika i po mnogim rezultatima je odgovorna za pojavu superprovodnosti [17], [18], [19]. Zbog slojevite strukture i velike anizotropije ovakvih sistema oni su gotovo idealan primer za primenu diperiodičnih grupa. Sama bakar-oksidna ravan (provodna ravan) se može analizirati nezavisno od ostatka kristala zbog toga što je efekat superprovodnosti isključivo vezan za nju, dok ostatak kristala pre svega obezbeđuje stabilnost sistema (sama bakar-oksidna ravan je nestabilna struktura) i njegovu elektroneutralnost. Naravno, strogo govoreći, analiza samo bakar-oksidne ravni je aproksimacija, koja je dovoljno dobra za sve osobine kristala koje su vezane za provodnu ravan i na koje ostatak kristala bitno ne utiče, pa se njegov uticaj može zanemariti.

U tabeli D.8 su data razlaganja dinamičkih reprezentacija za svaku orbitu grupe D_{6h} , razlaganje polarno vektorske reprezentacije, kao i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija. Za analizu bakar-oksidne ravni potrebno je naći razlaganje dinamičke reprezentacije celog sistema (ravni). Bakar-oksidna ravan je dvoorbitni sistem, naime, cela ravan se može dobiti delovanjem grupe na dve orbite grupe $\{0, 0, 0\}$ i $\{1/2, 0, 0\}$ (ili alternativno $\{1/2, 1/2, 0\}$ i $\{1/2, 0, 0\}$), gde se atomi bakra nalaze na prvoj orbiti a atomi kiseonika na drugoj. Na slici 4.2 je prikazan deo bakaroksidne ravni.



Slika 4.2: Bakar-oksidna ravan u kupratima.

Dinamička reprezentacija sistema je, kao što je objašnjeno u poglavlju 2, jednaka direktnom zbiru dinamičkih reprezentacija orbita od kojih se sastoji sistem, dok je razlaganje di-

namičke reprezentacije jednako zbiru razlaganja dinamičkih reprezentacija za svaku od orbita koje generišu sistem. Razlaganje vibracione reprezentacije se dobija oduzimanjem razlaganja polarno-vektorske reprezentacije od razlaganja dinamičke reprezentacije celog sistema. U tabeli 4.5, u koloni CuO , je dato razlaganje vibracione reprezentacije za bakar-oksidnu ravan, dok je u kolonama označenim velikim latiničnim slovima dato razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija grupe (kao u tabeli D.8).

Iz tabele 4.5 se vidi da razlaganje vibracione reprezentacije nema zajedničkih komponenti sa razlaganjem simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija iz prve dve klase (kolone A , i B). Klase A i B čine sve reprezentacije iz specijalnih tačaka, $\{0, 0\}$ i $\{\pi, \pi\}$, Brillouin-ove zone, što zapravo znači da ne postoji elektron-fonon interakcija između fonona i elektrona koji se nalaze u stanjima u specijalnim tačkama zone. Pored toga, pošto klasa B sadrži dvodimenzionalne reprezentacije iz pomenutih tačaka to znači da je i za samu bakar-oksidnu ravan narušen *Jahn-Teller-ov* teorem za elektronska stanja iz specijalnih tačaka visoke simetrije. Rezultat je sasvim očekivan, s obzirom da je *Jahn-Teller-ov* teorem narušen za obe orbite od kojih se sastoji bakar-oksidna ravan (tabela D.8). Odsustvo zajedničkih komponenti u razlaganju vibracione reprezentacije i dve klase simetrizovanih kvadrata koje narušavaju teorem je lakše uočiti u tabeli 4.6.

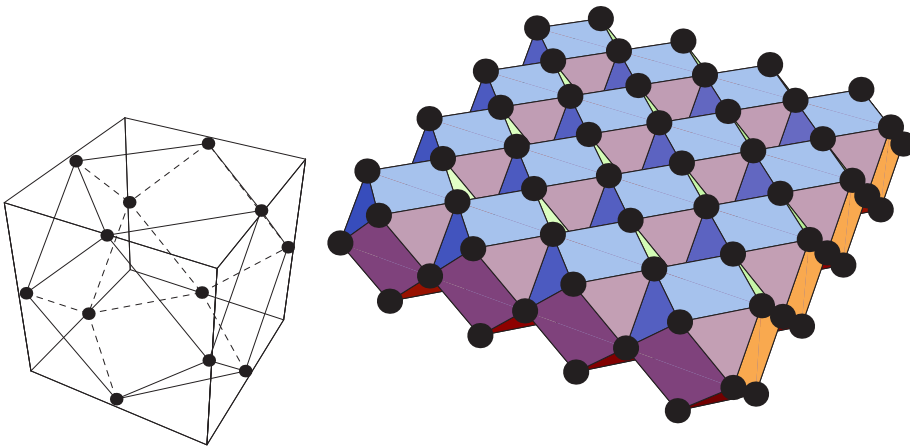
Naravno, postavlja se pitanje koliko je ovaj rezultat relevantan, odnosno da li postojanje degenerisanih elektronskih nivoa u osnovnom stanju, ima bilo kakve posledice na osobine kristala. Intuitivno je prilično očigledno da bi jedna ovako ekskluzivna osobina morala da ostavi traga bar na elektronski sistem, ali, sa druge strane, efekat degeneracije je relevantan samo ako *Fermi-jev* nivo prolazi blizu ili, što bi bilo idealno, tačno kroz neku od specijalnih tačaka koje narušavaju teorem. Kod diperiodičnih sistema, za razliku od monoperiodičnih, retko dolazi do *nesting-a* (eksperimentalno nije potvrđen), odnosno mala je verovatnoća da *Fermi-jev* nivo prođe tačno kroz neku od specijalnih tačaka. Sa druge strane elektroni koji se, po većini teorija, sparuju [15], su upravo elektroni koji se nalaze na degenerisanim nivoima. Ova, naizgled čudna podudarnost je dodatni motiv za dalja istraživanja u pravcu nalaženja posledica odsustva elektron-fonon interakcije u nekim tačkama zone.

4.4.5 Sistemi sa teškim fermionima

Drugi interesantan primer diperiodičnih sistema je klasa superprovodnika sa teškim fermionima. Za najnovije materijale, $CeIrIn_5$ i $CeRhIn_5$, iz ove klase eksperimenti ukazuju [20], da je pojava superprovodnosti vezana za indijumski sloj (slika 4.3). Na isti način kao i za bakar-oksidnu ravan 4.4.4, mogu se klasifikovati normalne mode za indijumski sloj, i može se ispitati *Jahn-Teller-ov* efekat za ceo sloj. Indijumski sloj je dvoorbitni sistem, i sastoji se od orbita $\{0, 0, 0\}$ i $\{1/2, 0, z\}$ (alternativno $\{1/2, 1/2, 0\}$ i $\{1/2, 0, z\}$). Razlaganje vibracione reprezentacije za ceo sloj je dato u koloni označenoj sa In , u tabeli 4.5. Kao što se iz tabele može videti za ceo indijumski sloj nema odsustva elektron fonon interakcije, mada je za jednu orbitu ($\{0,0,0\}$) narušen *Jahn-Teller-ov* teorem.

4.4.6 Grafitna ravan

Poslednji primer primene dobijenih rezultata na diperiodične sisteme je grafitna ravan. Jedna grafitna ravan je prilično nestabilna struktura, ali zbog toga što se analizom grafitne

Slika 4.3: Indijumski sloj u kristalima CeIrIn_5 i CeRhIn_5 .

ravni može dosta toga reći i o osobinama karbonskih nanotuba, ovaj sistem je u posljednje vreme prilično zanimljiv. Jedna grafitna ravan je heksagonalan jednoorbitni sistem čija je grupa simetrije D_{6h} . Kao što je prikazano u tabeli 4.4 ne postoji elektron-fonon interakcija sa elektronima iz specijalnih tačaka. Pored toga moguće je, pored dvostruko degenerisanog, i trostruko degenerisano osnovno elektronsko stanje, odnosno ne postoji elektron-fonon (u okviru adijabatske aproksimacije) interakcija koja bi ga ukinula, što se lakše može uočiti u tabeli 4.7. Naravno, i kod grafita bi ova ekskluzivna osobina bila relevantna ukoliko bi *Fermi*-jev nivo prolazio kroz neku od specijalnih tačaka. Grafit je posebno interesantan, kao što je rečeno, zbog toga što se karbonske nanotube mogu shvatiti i kao savijena grafitna ravan (nanotube se, naravno, ne mogu praviti savijanjem grafitne ravni), i može se posmatrati šta se događa sa članovima u hamiltonijanu koji opisuju elektron-fonon interakciju u slučaju nanotube, kada je sistem opisan nekom linijskom grupom, i u limesu kada poluprečnik nanotube teži beskonačnosti, odnosno kada je sistem opisan diperiodičnom grupom. Za sve linijske grupe *Jahn-Teller*-ov teorem je ispunjen [4], dok je, kao što je već rečeno, narušen za grafitnu ravan.

Tabela 4.6: Razlaganje vibracionih reprezentacija za bakar-oksidnu ravan (CuO), indijumski sloj iz sistema sa teškim fermionima (In) i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija grupe Dg61, kod kojih je narušen *Jahn-Teller*-ov teorem.

IR.	CuO	In	A	B	IR.	CuO	In	A	B	IR.	CuO	In	A	B
1	0	1	1	1	15	2	3	0	0	29	3	4	0	0
2	1	1	0	0	16	1	2	0	0	30	2	4	0	0
3	0	0	0	0	17	2	2	0	0	31	3	4	0	0
4	0	0	0	0	18	0	1	0	0	32	1	3	0	0
5	0	1	0	1	19	1	1	0	0	33	3	4	0	0
6	1	1	0	0	20	1	2	0	0	34	2	4	0	0
7	0	0	0	1	21	1	1	0	0	35	3	4	0	0
8	0	0	0	0	22	0	1	0	0	36	1	3	0	0
9	2	2	0	0	23	1	1	0	0	37	3	5	0	0
10	0	2	0	0	24	0	1	0	0	38	3	5	0	0
11	1	2	0	0	25	1	1	0	0	39	3	3	0	0
12	2	3	0	0	26	0	1	0	0	40	0	2	0	0
13	1	1	0	0	27	1	2	0	0	41	6	8	0	0
14	0	1	0	0	28	1	1	0	0	42	3	7	0	0

Tabela 4.7: Razlaganje vibracione reprezentacije za grafitnu ravan i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija grupe Dg80, koji narušavaju *Jahn-Teller*-ov teorem.

IR.	vib.	A	B	C	D	F	IR.	vib.	A	B	C	D	F
1	0	1	1	1	1	1	21	0	0	0	0	0	0
2	0	0	0	0	0	0	22	1	0	0	0	0	0
3	0	0	0	0	0	0	23	1	0	0	0	0	0
4	0	0	0	0	0	0	24	0	0	0	0	0	0
5	0	0	0	0	0	0	25	1	0	0	0	0	0
6	0	0	0	0	0	0	26	0	0	0	0	0	0
7	0	0	0	0	0	0	27	1	0	0	0	0	0
8	0	0	0	0	0	0	28	0	0	0	0	0	0
9	0	0	0	0	0	0	29	1	0	0	0	0	0
10	0	0	0	0	0	0	30	1	0	0	0	0	0
11	0	0	1	1	0	1	31	1	0	0	0	0	0
12	0	0	0	0	0	0	32	0	0	0	0	0	0
13	0	0	0	0	1	0	33	1	0	0	0	0	0
14	0	0	0	0	0	0	34	1	0	0	0	0	0
15	0	0	0	0	0	0	35	1	0	0	0	0	0
16	1	0	0	0	0	0	36	0	0	0	0	0	0
17	1	0	0	0	0	0	37	1	0	0	0	0	0
18	0	0	0	0	0	0	38	1	0	0	0	0	0
19	0	0	0	0	0	1	39	2	0	0	0	0	0
20	0	0	0	0	0	0	40	1	0	0	0	0	0

Glava 5

Zaključak

U ovom radu je izračunato razlaganje dinamičke reprezentacije za *sve* diperioidične grupe, pored toga je izračunato i razlaganje vibracione reprezentacije za svaku orbitu svake diperioidične grupe. Ovaj rezultat klasifikuje normalne mode za *bilo koji* realan kristal koji ima diperioidičnu simetriju. Izračunata su i razlaganja simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija za svaku grupu, što zajedno sa razlaganjem vibracionih reprezentacija omogućava ispitivanje *Jahn-Teller-ovg* efekta. *Jahn-Teller-ov* efekat je ispitan za sve diperioidične sisteme i po *prvi put* je ustanovljeno da postoje grupe kod kojih je za neke orbite *narušen Jahn-Teller-ov efekat*, odnosno da postoje degenerisani elektronski nivoi u osnovnom stanju sistema. Gotovo neverovatna je podudarnost da su grupe kod kojih je otkriveno narušenje *Jahn-Teller-ovog* teorema upravo grupe simetrije provodne CuO_2 ravni, koja je odgovorna za pojavu visokotemperaturske superprovodnosti, kao i grupe simetrije superprovodnika sa teškim fermionima i grafitnog sloja (koji ima mnoge osobine slične karbonskim nanotubama). Sa rezultatima koji su izloženi u ovom radu moguće je dati tip kristala kod koga bi nedeostatak elektron-fonon interakcije bio izražen.

Dalje istraživanje se može odvijati u više pravaca. Pre svega treba ispitati relevantnost odsustva *Jahn-Teller-ovog* efekta, odnosno treba naći vezu između odsustva efekta i nekih, po mogućstvu lako merljivih, fizičkih veličina. Sa druge strane može se nastaviti sa standardnom primenom teorije grupa na diperioidične sisteme, nalaženje magnetnih grupa, izračunavanje selekcionih pravila, računanje invarijantnih (i kovarijantnih) funkcionala za diperioidične grupe, ispitivanje mogućih faznih prelaza u okviru Landau-ovljeve teorije [16], nalaženje *Clebsch-Gordan-ovih* serija i još mnogo toga.

Veliki broj atraktivnih i nerešenih problema, kao i izuzetna atraktivnost diperioidičnih sistema (visokotemperaturski superprovodnici, superprovodnici sa teškim fermionima, tanki poluprovodni slojevi, grafit i sl.) garantuje da istraživanja na ovom, tek otvorenom, polju mogu dati mnogo relevantnih rezultata, što samim tim potvrđuje svrsishodnost daljeg rada na primeni diperioidičnih grupa u fizici čvrstog stanja.

Dodatak A

Oznake diperiodičnih grupa

U tabeli A.1 su paralelno date oznake diperiodičnih grupa iz radova [1] i [3]. U kolonama označenim sa Dg i L respektivno, su dati redni brojevi diperiodičnih grupa, iz već navedenih radova. U preostalim kolonama se nalaze međunarodni simboli diperiodičnih grupa. U oba slučaja početna slova simbola označavaju tip rešetke, p za primitivnu rešetku, c za centriranu. Opšta oznaka ima oblik $pzxy$, gde na mestima x , y , z stoje oznake: reda ose rotacije oko ose koja sadrži odgovarajuću osu (na primer $p422$ znači da grupa sadrži osu četvrtog reda duž z -ose, i ose drugog reda duž x , i y -ose); oznaku ravni refleksije m ili n , tako da mesto u oznaci odgovara pravcu normale na ravan; oznaku klizne ravni a ili b , istog smisla kao i za obične ravni refleksije; oznaku za zavojnu osu 2_1 , koja se nalazi na mestu koje ukazuje na položaj ose. Ako grupa sadrži osu rotacije i ravan refleksije koja je paralelna sa osom rotacije oznaka je oblika $p\frac{4}{m}$. Pored ovih oznaka u literaturi se mogu sresti i skraćene oznake za pojedine grupe, na primer oznaka $p4/mmm$ je u stvari skraćeni oblik od $p\frac{4}{m}\frac{2}{m}\frac{2}{m}$. Oznake u radu [3] se razlikuju za ortorombične grupe, odnosno, preiznije rečeno permutovane su. Ključ za njihovo čitanje bi bio $pxyz$. Za većinu grupa (osim onih najvećih) se iz međunarodnih oznaka mogu pročitati generatori grupa, što omogućava dodatnu proveru faktorizacije diperiodičnih grupa.

Tabela A.1: **Oznake diperiodičnih grupa.** Za svaku diperiodičnu grupu **Dg**, dati su redni brojevi i oznake iz rada [1], kao i redni brojevi i međunarodne oznake iz rada [3].

E.W.		K&L		E.W.		K&L	
Dg		L		Dg		L	
1	P1	1	p1	41	$P_{\frac{2}{2} \frac{2_1}{2}}$	41	pmma
2	$P\bar{1}$	2	$p\bar{1}$	42	$P_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2_1}{2}}$	42	pman
3	P211	3	p112	43	$P_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2_1^a}{2}}$	43	pbaa
4	Pm11	4	p11m	44	$P_{\frac{2}{2} \frac{2_1^b}{2} \frac{2_1}{2}}$	44	pbam
5	Pb11	5	p11a	45	$P_{\frac{2}{2} \frac{2_1^b}{2} \frac{2_1^a}{2}}$	45	pbma
6	$P_{\frac{2}{2}} 11$	6	p112/m	46	$P_{\frac{2}{2} \frac{2_1}{2} \frac{2_1}{2}}$	46	pmmn
7	$P_{\frac{2}{b}} 11$	7	p112/a	47	$C_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2}{2}}$	47	cmmm
8	P112	8	p211	48	$C_{\frac{2}{a} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	48	cmma
9	P112 ₁	9	p2 ₁ 11	49	P4	49	p4
10	C112	10	c211	50	$P\bar{4}$	50	$p\bar{4}$
11	P11m	11	pm11	51	P4/m	51	p4/m
12	P11a	12	pb11	52	P4/n	52	p4/n
13	C11m	13	cm11	53	P422	53	p422
14	$P11_{\frac{2}{m}}$	14	p2/m11	54	P42 ₁ 2	54	p42 ₁ 2
15	$P11_{\frac{2_1}{2}}$	15	p2 ₁ /m11	55	P4mm	55	p4mm
16	$C11_{\frac{2}{2}}$	18	c2/m11	56	P4bm	56	p4bm
17	$P11_{\frac{2}{2}}$	16	p2/b11	57	$P\bar{4}2m$	57	$p\bar{4}2m$
18	$P11_{\frac{2_1^a}{a}}$	17	p2 ₁ /b11	58	$P\bar{4}2_1m$	58	$p\bar{4}2_1m$
19	P222	19	p222	59	$P\bar{4}m2$	59	$p\bar{4}m2$
20	P222 ₁	20	p2 ₁ 22	60	$P\bar{4}b2$	60	$p\bar{4}b2$
21	P22 ₁ 2 ₁	21	p2 ₁ 2 ₁ 2	61	$P_{\frac{4}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	61	p4/mmm
22	C222	22	c222	62	$P_{\frac{4}{n} \frac{2}{b} \frac{2}{m}}$	62	p4/nbm
23	P2mm	23	pmm2	63	$P_{\frac{4}{n} \frac{2_1^b}{2} \frac{2_2}{2}}$	63	p4/mbm
24	Pmm2	27	pm2m	64	$P_{\frac{4}{n} \frac{2_1^b}{m} \frac{2}{m}}$	64	p4/nmm
25	Pm2 ₁ a	29	pb2 ₁ m	65	P3	65	p3
26	Pbm2 ₁	28	pm2 ₁ b	66	$P\bar{3}$	66	$p\bar{3}$
27	Pbb2	30	pb2b	67	P312	67	p312
28	P2ma	24	pma2	68	P321	68	p321
29	Pam2	31	pm2a	69	P3m1	69	p3m1
30	Pab2 ₁	33	pb2 ₁ a	70	P31m	70	p31m
31	Pnb2	34	pb2n	71	$P\bar{3}1_{\frac{2}{m}}$	71	$p\bar{3}1m$
32	Pnm2 ₁	32	pm2 ₁ n	72	$P\bar{3}_{\frac{2}{m}} 1$	72	$p\bar{3}m1$
33	P2ba	25	pba2	73	P6	73	p6
34	C2mm	26	cmm2	74	$P\bar{6}$	74	$p\bar{6}$
35	Cmm2	35	cm2m	75	P6/m	75	p6/m
36	Cam2	36	cm2a	76	P622	76	p622
37	$P_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2}{2}}$	37	pmmm	77	P6mm	77	p6mm
38	$P_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2}{2}}$	38	pmaa	78	$P\bar{6}m2$	78	$p\bar{6}m2$
39	$P_{\frac{2}{2} \frac{2}{2} \frac{2}{2}}$	39	pban	79	$P\bar{6}2m$	79	$p\bar{6}2m$
40	$P_{\frac{2}{m} \frac{2_1^b}{2} \frac{2}{a}}$	40	pmam	80	$P_{\frac{6}{m} \frac{2}{m} \frac{2}{m}}$	80	p6/mmm

Dodatak B

Orbite diperiodičnih grupa

B.1 Orbite

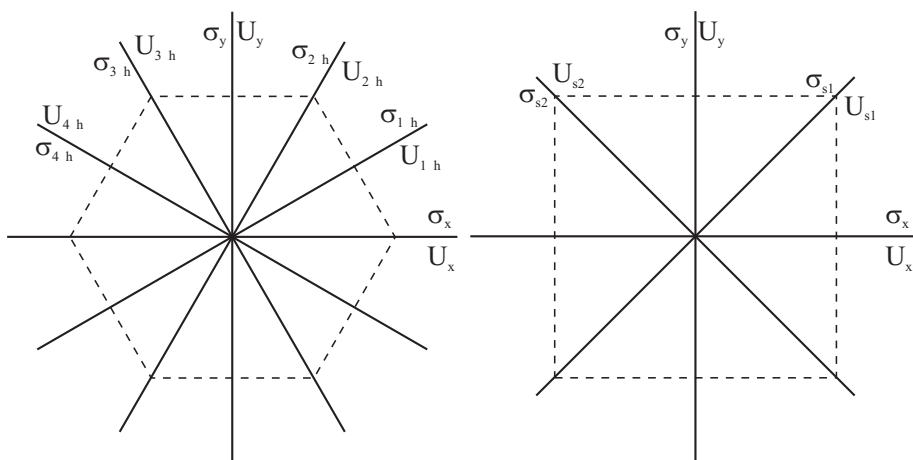
Dejstvo grupe u euklidskom prostoru stratifikuje ceo prostor, odnosno ceo prostor je unija svih *stratusa*. Stratusi su mnogostrukosti na kojima se nalaze sve fiksne (nepokretne) tačke elemenata određene podgrupe (male grupe) grupe. Unutar stratusa, fiksiranjem koordinata, dobijaju se *orbite*, odnosno može se reći da su orbite predstavnici stratusa. Na primer, ako je jedan od stratusa neke grupe prava, $\{x, 0, 0\}$, onda se različite orbite dobijaju za različite vrednosti koordinate x . Sve orbite unutar istog stratusa imaju istu simetriju. Predstavnici iste orbite (tačke) su invarijantni na dejstvo nekih elemenata grupe. Skup svih elemenata grupe koji ostavljaju invarijantnim bilo kog člana iste orbite čini grupu, koja se naziva *malom grupom* određene orbite (L). Male grupe su konačnog reda (redovi malih grupa $|L|$ su u tabeli B.1 u petoj koloni). Različite tačke iste orbite mogu imati ili identične male grupe, ili međusobno konjugovane nekim elementom grupe (unutrašnja konjugacija), što zapravo znači da sve tačke sa iste orbite imaju iste male grupe, a to dalje znači da sve orbite sa istog stratusa imaju iste male grupe.

Broj tačaka u orbitama diperiodičnih grupa je beskonačan, ali moguće je izdvojiti konačan podskup tačaka, za svaku orbitu, iz koga se, delujući samo translacijama na tačke iz tog skupa, može generisati cela orbita. Broj tačaka u ovakvom određujućem skupu je jednak *redu orbite* $|O|$ (u tabeli B.1 četvrta kolona). Za potpuno određenje neke orbite potrebno je znati samo jednog predstavnika orbite. Delovanjem faktor grupe DG/T^2 na tog predstavnika dobija se određujući skup, a daljim delovanjem translacijama, dobija se i cela orbita. Faktor grupa, u opštem slučaju, ne mora biti grupa. Kod simorfni grupa ona jeste grupa, dok je kod nesimorfni grupa faktor grupa skup elemenata koji čine tačkasta grupa i koseti generisani sa po jednom generalisanom translacijom. U tabeli B.1 dat je po jedan predstavnik svake orbite (u trećoj koloni). Oznake tačaka koje su predstavnici orbita označavaju ujedno i dimenziju stratusa. U već pomenutom primeru tačke $\{x, 0, 0\}$ jasno je da svaka orbita ovog tipa pripada istom stratusu, koji je prava.

Ova, pomalo, nestandardna definicija orbita, u stvari predstavlja opis algoritma kojim su programski pronađene orbite. Rezultat se u potpunosti slagao sa podacima iz rada [1].

B.2 Tabela

Tabela B.1 se unekoliko razlikuje od tabele iz rada [1]. Pre svega, dati su samo predstavnici orbita, za razliku od rada [1] u kome su dati celi određujući skupovi tačaka. Druga, konceptualna razlika je u tome što su u tabeli B.1 dati generatori malih grupa, što potpuno određuje svaku malu grupu, za razliku od tabele [1] u kojoj su dati simboli tačkastih grupa koje su izomorfne sa odgovarajućim malim grupama (U šestoj koloni tabele B.1 su dati generatori malih grupa.). Pored toga, usled višestrukih faktorizacija pojedinih diperiodičnih grupa u tabeli B.1 kod nekih grupa postoje tačke koje nisu date u određujućim skupovima u [1]. Slaganje sa tabelom [1] se postiže promenom koordinatnog sistema. Tako za grupe: (Dg8, Dg10, Dg24, Dg28, Dg29, Dg31, Dg32, Dg35, Dg40) rotacijom koordinatnog sistema za $\pi/2$ dobijaju se orbite iz rada [1]; za grupe (Dg7, Dg48) do slaganja dovodi translacija za $(I|0\frac{1}{4})$; za (Dg52, Dg54, Dg64*) translacija za $(I|\frac{1}{2}0)$; za grupe (Dg17, Dg38, Dg41, Dg45) potrebno je translirati koordinatni sistem za $(I|0\frac{1}{4})$ i zarotirati ga za $\pi/2$, dok je za grupu Dg43 potrebno translirati sistem za $(I|\frac{1}{4}\frac{1}{4})$ i rotirati ga za $\pi/2$ da bi se iz tabele B.1 dobile tačke iz rada [1]. Fiksne tačke elemenata grupa su nalažene programski pa je ponegde drugačiji redosled orbita nego u radu [1]. Da bi se smanjila mogućnost greške prilikom sređivanja podataka u tabeli B.1 je zadržan redosled orbita koji je dat u izlazu programa. Konačno, za grupe (Dg10, Dg13, Dg16, Dg22, Dg34, Dg35, Dg36, Dg47, Dg48) je naknadno udvostručen red orbita iz istog razloga zbog koga je udvostručen translacioni period kod centriranih rešetki C.1.



Slika B.1: Oznake generatora malih grupa koji su dati u tabeli B.1.

Tabela B.1: Orbite diperiodičnih grupa

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
1	1	$\{x, y, z\}$	1	1	I
2	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	2	$(S_2 11)$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	2	$(S_2 10)$
	4	$\{0, \frac{1}{2}, 0\}$	1	2	$(S_2 01)$
	5	$\{0, 0, 0\}$	1	2	S_2
3	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	1	2	$(C_2 11)$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	1	2	$(C_2 10)$
	4	$\{0, \frac{1}{2}, z\}$	1	2	$(C_2 01)$
	5	$\{0, 0, z\}$	1	2	C_2
4	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	1	2	σ_h
5	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
6	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	2	2	σ_h
	3	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(C_2 11)$
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	5	$\{0, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(C_2 01)$
	6	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	7	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(C_2 11), \sigma_h$
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	4	$(C_2 10), \sigma_h$
	9	$\{0, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(C_2 01), \sigma_h$
	10	$\{0, 0, 0\}$	1	4	σ_h, C_2
7	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	3	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	4	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(S_2 1\frac{1}{2})$
	5	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(S_2 0\frac{1}{2})$
8	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	1	2	$(U_x 01)$
	3	$\{x, 0, 0\}$	1	2	U_x
9	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
10	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{x, 0, 0\}$	1	2	U_x
11	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	1	2	$(\sigma_x 01)$
	3	$\{x, 0, z\}$	1	2	σ_x
12	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
13	1	$\{x, y, z\}$	2	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	1	2	σ_x

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
14	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 01)$
	3	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	4	$\{\frac{1}{2}, y, 0\}$	2	2	$(U_y 10)$
	5	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
	6	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(\sigma_x 01), (U_y 10)$
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	4	$(S_2 10), \sigma_x$
	8	$\{0, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(S_2 01), U_y$
	9	$\{0, 0, 0\}$	1	4	σ_x, S_2
15	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{4}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 0\frac{1}{2})$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	2	$(S_2 10)$
	4	$\{0, 0, 0\}$	2	2	S_2
16	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	3	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
	4	$\{0, 0, 0\}$	1	4	σ_x, S_2
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	4	$(S_2 10), \sigma_x$
	6	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(S_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
17	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, 0\}$	2	2	U_x
	3	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(S_2 1\frac{1}{2})$
	4	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(S_2 0\frac{1}{2})$
18	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{0, 0, 0\}$	2	2	S_2
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	2	$(S_2 10)$
19	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	2	2	$(U_x 01)$
	3	$\{x, 0, 0\}$	2	2	U_x
	4	$\{\frac{1}{2}, y, 0\}$	2	2	$(U_y 10)$
	5	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(C_2 11)$
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	7	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
	8	$\{0, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(C_2 01)$
	9	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	10	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(U_x 01), (U_y 10)$
	11	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	4	$(C_2 10), U_x$
	12	$\{0, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(C_2 01), U_y$
	13	$\{0, 0, 0\}$	1	4	U_x, C_2
20	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{4}, 0\}$	2	2	$(U_x 0\frac{1}{2})$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
21	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
22	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, 0\}$	2	2	U_x
	3	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
	4	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	6	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z\}$	2	2	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	7	$\{0, 0, 0\}$	1	4	U_x, C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	4	$(C_2 10), U_x$
23	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 01)$
	3	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	4	$\{\frac{1}{2}, y, z\}$	2	2	$(\sigma_y 10)$
	5	$\{0, y, z\}$	2	2	σ_y
	6	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	1	4	$(\sigma_x 01), (\sigma_y 10)$
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	1	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	8	$\{0, \frac{1}{2}, z\}$	1	4	$(C_2 01), \sigma_y$
	9	$\{0, 0, z\}$	1	4	σ_x, C_2
24	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	2	2	σ_h
	3	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 01)$
	4	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	5	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(U_x 01), \sigma_h$
	6	$\{x, 0, 0\}$	1	4	σ_h, U_x
25	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	2	2	σ_h
26	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, y, z\}$	2	2	$(\sigma_y 10)$
	3	$\{0, y, z\}$	2	2	σ_y
27	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, y, 0\}$	2	2	$(U_y 10)$
	3	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
28	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{4}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 0\frac{1}{2})$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
29	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{4}, z\}$	2	2	$(\sigma_x 0\frac{1}{2})$
	3	$\{x, 0, 0\}$	2	2	U_x
30	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
31	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, 0\}$	2	2	U_x
32	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
33	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
34	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	3	$\{0, y, z\}$	2	2	σ_y
	4	$\{0, 0, z\}$	1	4	σ_x, C_2
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	1	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	6	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z\}$	2	2	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
35	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	2	2	σ_h
	3	$\{x, 0, z\}$	2	2	σ_x
	4	$\{x, 0, 0\}$	1	4	σ_h, U_x
36	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{4}, y, z\}$	2	2	$(\sigma_y \frac{1}{2}0)$
	3	$\{0, y, 0\}$	2	2	U_y
37	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	4	2	σ_h
	3	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	4	2	$(\sigma_x 01)$
	4	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	5	$\{\frac{1}{2}, y, z\}$	4	2	$(\sigma_y 10)$
	6	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	7	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	2	4	$(U_x 01), \sigma_h$
	8	$\{x, 0, 0\}$	2	4	σ_h, U_x
	9	$\{\frac{1}{2}, y, 0\}$	2	4	$(U_y 10), \sigma_h$
	10	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(\sigma_x 01), (\sigma_y 10)$
	11	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	12	$\{0, y, 0\}$	2	4	σ_h, U_y
	13	$\{0, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(C_2 01), \sigma_y$
	14	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_x, C_2
	15	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(U_x 01), (U_y 10), \sigma_h$
	16	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	8	$(C_2 10), \sigma_h, U_x$
	17	$\{0, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(C_2 01), \sigma_h, U_y$
	18	$\{0, 0, 0\}$	1	8	σ_h, U_x, C_2

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
38	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{4}, z\}$	4	2	$(\sigma_x 0\frac{1}{2})$
	3	$\{x, 0, 0\}$	4	2	U_x
	4	$\{\frac{1}{2}, y, 0\}$	4	2	$(U_y 10)$
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	6	$\{0, y, 0\}$	4	2	U_y
	7	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), U_x$
	9	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(\sigma_x 0\frac{1}{2}), (U_y 10)$
	10	$\{0, 0, 0\}$	2	4	U_y, C_2
	11	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(S_2 0\frac{1}{2}), U_y$
39	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, 0, 0\}$	4	2	U_x
	3	$\{0, y, 0\}$	4	2	U_y
	4	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	6	$\{0, 0, 0\}$	2	4	U_x, C_2
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), U_x$
	8	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(S_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
40	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	4	2	σ_h
	3	$\{x, \frac{1}{4}, z\}$	4	2	$(\sigma_x 0\frac{1}{2})$
	4	$\{x, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(\sigma_x 0\frac{1}{2}), \sigma_h$
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	6	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	2	4	σ_h, C_2
41	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	3	$\{\frac{1}{2}, y, z\}$	4	2	$(\sigma_y 10)$
	4	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	5	$\{x, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(U_x 0\frac{1}{2})$
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	7	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_y, C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(U_x 0\frac{1}{2}), (\sigma_y 10)$
	9	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(S_2 0\frac{1}{2}), \sigma_y$
42	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	3	$\{x, 0, 0\}$	4	2	U_x
	4	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z\}$	4	2	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	5	$\{0, 0, 0\}$	2	4	U_x, S_2
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(S_2 10), U_x$

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
43	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{0, y, 0\}$	4	2	U_y
	3	$\{\frac{1}{4}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 \frac{1}{2}0)$
	4	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(S_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
44	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	4	2	σ_h
	3	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	5	$\{0, 0, 0\}$	2	4	σ_h, C_2
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_h$
45	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	3	$\{\frac{1}{4}, y, 0\}$	4	2	$(U_y \frac{1}{2}0)$
	4	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(S_2 0\frac{1}{2})$
46	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	3	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	4	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_x, C_2
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	6	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(S_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
47	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	4	2	σ_h
	3	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	4	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	5	$\{x, 0, 0\}$	2	4	σ_h, U_x
	6	$\{0, y, 0\}$	2	4	σ_h, U_y
	7	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_x, C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	9	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z\}$	4	2	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	10	$\{0, 0, 0\}$	1	8	σ_h, U_x, C_2
	11	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	1	8	$(C_2 10), \sigma_h, U_x$
	12	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2}), \sigma_h$
48	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	3	$\{0, y, z\}$	4	2	σ_y
	4	$\{x, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(U_x 0\frac{1}{2})$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_y, C_2
	6	$\{\frac{1}{4}, y, 0\}$	4	2	$(U_y \frac{1}{2}0)$
	7	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, z\}$	4	2	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	8	$\{0, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(S_2 0\frac{1}{2}), \sigma_y$
	9	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	2	4	$(C_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2}), (U_y \frac{1}{2}0)$
	10	$\{\frac{1}{4}, 0, 0\}$	2	4	$(U_y \frac{1}{2}0), (S_2 \frac{1}{2}0)$

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
49	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	3	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	1	4	$(C_4 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	1	4	C_4
50	1	$\{x, y, z\}$	4	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	2	$(C_2 11)$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	2	$(C_2 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	2	C_2
	5	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	4	$(S_4 10)$
	6	$\{0, 0, 0\}$	1	4	S_4
51	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	4	2	σ_h
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	4	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(C_4 10)$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	4	C_4
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_h$
	7	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(C_4 10), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	8	σ_h, C_4
52	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	3	$\{0, 0, z\}$	2	4	C_4
	4	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	2	$(S_2 \frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(S_4 \frac{1}{2} - \frac{1}{2})$
53	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, x, 0\}$	4	2	U_{s1}
	3	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	4	2	$(U_x 01)$
	4	$\{x, 0, 0\}$	4	2	U_x
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	6	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(C_4 10)$
	7	$\{0, 0, z\}$	2	4	C_4
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), U_x$
	9	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(C_4 10), U_{s1}$
	10	$\{0, 0, 0\}$	1	8	U_x, C_4
54	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2} + x, 0\}$	4	2	$(U_{s1} -\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	4	C_4
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(U_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10)$

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
55	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	4	2	σ_{s1}
	3	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	4	2	$(\sigma_x 01)$
	4	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	6	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	1	8	$(C_4 10), \sigma_{s1}$
	7	$\{0, 0, z\}$	1	8	σ_x, C_4
56	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2} + x, z\}$	4	2	$(\sigma_{s1} -\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(\sigma_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	4	C_4
57	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	4	2	σ_{s1}
	3	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	4	2	$(U_x 01)$
	4	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(C_2 11), \sigma_{s1}$
	5	$\{x, 0, 0\}$	4	2	U_x
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	7	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_{s2}, C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(C_2 10), U_x$
	9	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(S_4 10), \sigma_{s1}$
	10	$\{0, 0, 0\}$	1	8	U_x, S_4
58	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2} + x, 0\}$	4	2	$(U_{s1} -\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	3	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	2	$(C_2 10)$
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	4	$(U_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10)$
	6	$\{0, 0, 0\}$	2	4	S_4
59	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	4	2	$(\sigma_x 01)$
	3	$\{x, 0, z\}$	4	2	σ_x
	4	$\{x, x, 0\}$	4	2	U_{s1}
	5	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	4	$(\sigma_x 01), (\sigma_y 10)$
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	7	$\{0, 0, z\}$	2	4	σ_x, C_2
	8	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	8	$(S_4 10), U_{s1}$
	9	$\{0, 0, 0\}$	1	8	U_{s1}, S_4
60	1	$\{x, y, z\}$	8	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2} + x, z\}$	4	2	$(\sigma_{s1} -\frac{1}{2}\frac{1}{2})$
	3	$\{0, 0, z\}$	4	2	C_2
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	4	$(\sigma_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10)$
	5	$\{0, 0, 0\}$	2	4	S_4

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
61	1	$\{x, y, z\}$	16	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	8	2	σ_h
	3	$\{x, x, z\}$	8	2	σ_{s1}
	4	$\{x, \frac{1}{2}, z\}$	8	2	$(\sigma_x 01)$
	5	$\{x, 0, z\}$	8	2	σ_x
	6	$\{x, x, 0\}$	4	4	σ_h, σ_{s1}
	7	$\{x, \frac{1}{2}, 0\}$	4	4	$(\sigma_x 01), \sigma_h$
	8	$\{x, 0, 0\}$	4	4	σ_h, σ_x
	9	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	10	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, z\}$	2	8	$(C_4 10), \sigma_{s1}$
	11	$\{0, 0, z\}$	2	8	σ_x, C_4
	12	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	8	$(C_2 10), \sigma_h, \sigma_x$
	13	$\{\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, 0\}$	1	16	$(C_4 10), \sigma_h, \sigma_{s1}$
	14	$\{0, 0, 0\}$	1	16	σ_h, σ_x, C_4
62	1	$\{x, y, z\}$	16	1	I
	2	$\{x, \frac{1}{2} + x, z\}$	8	2	$(\sigma_{s1} -\frac{1}{2} \frac{1}{2})$
	3	$\{x, 0, z\}$	8	2	σ_x
	4	$\{x, x, 0\}$	8	2	U_{s1}
	5	$\{0, 0, z\}$	4	4	σ_x, C_2
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	2	8	$(\sigma_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_4 \frac{1}{2} - \frac{1}{2})$
	7	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	4	$(S_2 \frac{1}{2} \frac{1}{2}), U_{s1}$
	8	$\{0, 0, 0\}$	2	8	U_{s1}, S_4
63	1	$\{x, y, z\}$	16	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	8	2	σ_h
	3	$\{x, \frac{1}{2} + x, z\}$	8	2	$(\sigma_{s1} -\frac{1}{2} \frac{1}{2})$
	4	$\{x, \frac{1}{2} + x, 0\}$	4	4	$(U_{s1} -\frac{1}{2} \frac{1}{2}), (\sigma_{s1} -\frac{1}{2} \frac{1}{2})$
	5	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	4	$(\sigma_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10)$
	6	$\{0, 0, z\}$	4	4	C_4
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	8	$(\sigma_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_2 10), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	2	8	σ_h, C_4
64	1	$\{x, y, z\}$	16	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	8	2	σ_{s1}
	3	$\{x, \frac{1}{2} + x, 0\}$	8	2	$(U_{s1} -\frac{1}{2} \frac{1}{2})$
	4	$\{x, 0, 0\}$	8	2	U_x
	5	$\{0, 0, z\}$	4	4	σ_{s2}, C_2
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	4	4	$(C_4 \frac{1}{2} - \frac{1}{2})$
	7	$\{\frac{1}{4}, \frac{1}{4}, 0\}$	4	4	$(S_2 \frac{1}{2} \frac{1}{2}), \sigma_{s1}$
	8	$\{0, 0, 0\}$	2	8	U_x, S_4
	9	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	2	8	$(U_{s1} \frac{1}{2} - \frac{1}{2}), (C_4 \frac{1}{2} - \frac{1}{2})$
65	1	$\{x, y, z\}$	3	1	I
	2	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z\}$	1	3	$(C_3 10)$
	3	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	1	3	$(C_3^2 01)$
	4	$\{0, 0, z\}$	1	3	C_3

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
66	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	3	$\{0, 0, z\}$	2	3	C_3
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	2	$(S_2 10)$
	5	$\{0, 0, 0\}$	1	6	S_6
67	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{x, -x, 0\}$	3	2	U_{4h}
	3	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z\}$	2	3	$(C_3 10)$
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	3	C_3
	6	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\}$	1	6	$(C_3 10), U_{1h}$
	7	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	1	6	$(C_3^2 01), U_y$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	6	U_{1h}, C_3
68	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{x, x, 0\}$	3	2	U_{2h}
	3	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	4	$\{0, 0, z\}$	2	3	C_3
	5	$\{0, 0, 0\}$	1	6	U_x, C_3
69	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{x, -x, z\}$	3	2	σ_{4h}
	3	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z\}$	1	6	$(C_3 10), \sigma_{1h}$
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	1	6	$(C_3^2 01), \sigma_y$
	5	$\{0, 0, z\}$	1	6	σ_{1h}, C_3
70	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	3	2	σ_{2h}
	3	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	4	$\{0, 0, z\}$	1	6	σ_x, C_3
71	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	6	2	σ_{2h}
	3	$\{x, -x, 0\}$	6	2	U_{4h}
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	4	3	$(C_3^2 01)$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	6	σ_x, C_3
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	4	$(S_2 10), \sigma_x$
	7	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	2	6	$(C_3^2 01), U_y$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	12	U_{1h}, S_6
72	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, -x, z\}$	6	2	σ_{4h}
	3	$\{x, x, 0\}$	6	2	U_{2h}
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	6	$(C_3^2 01), \sigma_y$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	6	σ_{4h}, C_3
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	4	$(S_2 10), U_x$
	7	$\{0, 0, 0\}$	1	12	U_x, S_6

Tabela B.1: nastavak

DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
73	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	3	2	$(C_2 10)$
	3	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	4	$\{0, 0, z\}$	1	6	C_6
74	1	$\{x, y, z\}$	6	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	3	2	σ_h
	3	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z\}$	2	3	$(C_3 10)$
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	3	$(C_3^2 01)$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	3	C_3
	6	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\}$	1	6	$(C_3 10), \sigma_h$
	7	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	1	6	$(C_3^2 01), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	6	σ_h, C_3
75	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	6	2	σ_h
	3	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	6	2	$(C_2 10)$
	4	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	4	3	$(C_3^2 01)$
	5	$\{0, 0, z\}$	2	6	C_6
	6	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	4	$(C_2 10), \sigma_h$
	7	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	2	6	$(C_3^2 01), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	12	σ_h, C_6
76	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, x, 0\}$	6	2	U_{2h}
	3	$\{x, -x, 0\}$	6	2	U_{4h}
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	6	2	$(C_2 10)$
	5	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	4	3	$(C_3^2 01)$
	6	$\{0, 0, z\}$	2	6	C_6
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	4	$(C_2 10), U_x$
	8	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	2	6	$(C_3^2 01), U_y$
	9	$\{0, 0, 0\}$	1	12	U_x, C_6
77	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, x, z\}$	6	2	σ_{2h}
	3	$\{x, -x, z\}$	6	2	σ_{4h}
	4	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	3	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	5	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	6	$(C_3^2 01), \sigma_y$
	6	$\{0, 0, z\}$	1	12	σ_x, C_6

Tabela B.1: nastavak

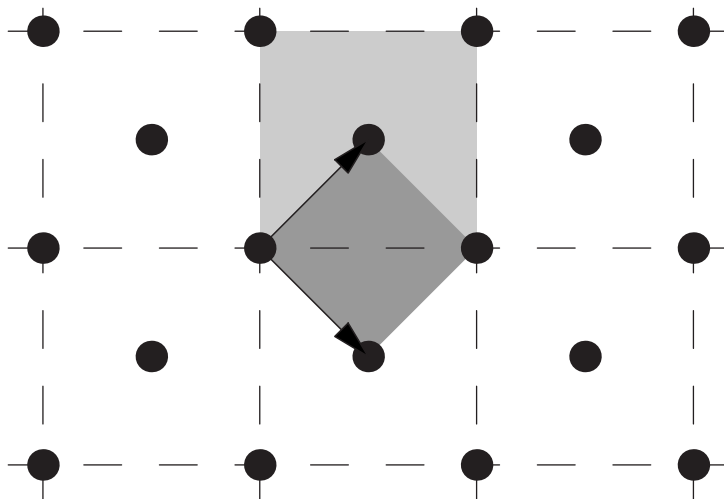
DG		Pts	$ O $	$ L $	gens
78	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	6	2	σ_h
	3	$\{x, -x, z\}$	6	2	σ_{4h}
	4	$\{x, -x, 0\}$	3	4	σ_h, U_{4h}
	5	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, z\}$	2	6	$(C_3 10), \sigma_{1h}$
	6	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	2	6	$(C_3^2 01), \sigma_y$
	7	$\{0, 0, z\}$	2	6	σ_{1h}, C_3
	8	$\{\frac{2}{3}, \frac{1}{3}, 0\}$	1	12	$(C_3 10), \sigma_h, U_{1h}$
	9	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	1	12	$(C_3^2 01), \sigma_h, U_y$
	10	$\{0, 0, 0\}$	1	12	σ_h, U_{1h}, C_3
79	1	$\{x, y, z\}$	12	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	6	2	σ_h
	3	$\{x, x, z\}$	6	2	σ_{2h}
	4	$\{x, x, 0\}$	3	4	σ_h, U_{2h}
	5	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	4	3	$(C_3^2 01)$
	6	$\{0, 0, z\}$	2	6	σ_x, C_3
	7	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	2	6	$(C_3^2 01), \sigma_h$
	8	$\{0, 0, 0\}$	1	12	σ_h, U_x, C_3
80	1	$\{x, y, z\}$	24	1	I
	2	$\{x, y, 0\}$	12	2	σ_h
	3	$\{x, x, z\}$	12	2	σ_{2h}
	4	$\{x, -x, z\}$	12	2	σ_{4h}
	5	$\{x, x, 0\}$	6	4	σ_h, U_{2h}
	6	$\{x, -x, 0\}$	6	4	σ_h, U_{4h}
	7	$\{\frac{1}{2}, 0, z\}$	6	4	$(C_2 10), \sigma_x$
	8	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, z\}$	4	6	$(C_3^2 01), \sigma_y$
	9	$\{0, 0, z\}$	2	12	σ_x, C_6
	10	$\{\frac{1}{2}, 0, 0\}$	3	8	$(C_2 10), \sigma_h, U_x$
	11	$\{\frac{1}{3}, \frac{2}{3}, 0\}$	2	12	$(C_3^2 01), \sigma_h, U_y$
	12	$\{0, 0, 0\}$	1	24	σ_h, U_x, C_6

Dodatak C

Detalji računa

C.1 Centrirane rešetke

Diperiodične grupe (DG10, DG13, DG16, DG22, DG34, DG35, DG36, DG47, DG48) su po međunarodnim oznakama označene kao *centrirane*, odnosno osim čistih translacija postoji i translacija $(I|\frac{1}{2}\frac{1}{2})$. Svih devet grupa sa centriranim rešetkama su ekvivalentne grupama sa primitivnim rešetkama, kod kojih je ugao između bazisnih vektora translacija oštar, translacioni periodi su jednaki i elementarna ćelija je dva puta manja (samim tim je *Brillouin*-ova zona dva puta veća). Jedini razlog za uvođenje centriranih rešetki je identifikacija ovih grupa u tabelama u literaturi.



Slika C.1: Centrirane rešetke: Svetlije osenčena površina predstavlja centriranu rešetku, dok je tamnija površina njoj ekvivalentna rombična rešetka.

C.2 Razlaganje simetrizovanih kvadrata reprezentacija – altenartivni metod

Standardna procedura razlaganja simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija podrazumeva korišćenje standardnog metoda grupnih projektoru. Međutim, zbog velikih dimenzija matrica, računari kojima raspolažemo nisu u mogućnosti da u nekom razumnom vremenu sprovedu standardnu proceduru. Takođe i verovatnoća da se, usled numeričke nepreciznosti, dobiju pogrešni rezultati je velika. Zbog svega toga bilo je nužno razviti alternativni metod razlaganja simetrizovanih kvadrata. Ovaj alternativni metod koristi karaktere reprezentacija.

Jasno je da karakter (trag) reprezentacije koja se razlaže mora biti jednak zbiru karaktera reprezentacija koje se javljaju u razlaganju (direktan zbir reprezentacija u razlaganju je jednak reprezentaciji koja se razlaže, a poznato je da je trag direktnog zbira matrica jednak zbiru tragova pojedinačnih matrica). Ako bi karakteri ireducibilnih reprezentacija bili međusobno ortogonalni, onda bi se razlaganje proizvoljne reprezentacije moglo naći kao projekcija karaktera reprezentacije koja se razlaže na prostor koji obrazuju karakteri ireducibilnih reprezentacija (normiranost se podrazumeva). Međutim kod diperiodičnih grupa nije sve tako jednostavno. Pre svega, karakteri reprezentacija neke grupe su zaista ortogonalni na klasama konjugacije. Diperiodične grupe imaju beskonačan broj klasa konjugacije. Drugi problem je u tome što se u simetrizovanim kvadratima spaja više vrednosti \mathbf{k} , odnosno u razlaganju se pojavljuju reprezentacije iz različitih oblasti *Brillouin*-ove zone. Ipak, oba ova problema su rešiva i zaista se može preko karaktera dobiti razlaganje simetrizovanih kvadrata.

Karakterir ireducibilnih reprezentacija neke grupe predstavljaju bazis vektorskog prostora V . U tom vektorskom prostoru karakteri su vektori, sa onoliko komponenti koliko ima klasa konjugacije u datoj grupi. To drugim rečima znači da karakter svake ireducibilne reprezentacije određuje jedan jednodimenzionalni potprostor $V^{\mathbf{k}}$, vektorskog prostora V . U slučaju diperiodičnih grupa (odnosno svih grupa koje sadrže i translacije) za svako fiksirano \mathbf{k} , direktni zbir potprostora za isto \mathbf{k} je takođe potprostor:

$$V^{\mathbf{k}} = \bigoplus_{\nu} V^{\mathbf{k}\nu}. \quad (\text{C.1})$$

Dimenzija potprostora $V^{\mathbf{k}}$ je jednaka broju različitih ireducibilnih reprezentacija za isto \mathbf{k} . Ceo vektorski prostor se može napisati kao zbir ovako dobijenih potprostora:

$$V = \bigoplus_{\mathbf{k}} V^{\mathbf{k}}. \quad (\text{C.2})$$

Broj različitih potprostora je beskonačan, kao i dimenzija ukupnog prostora, ali je svaki pojedinačni potprostor konačne dimenzije. Pored toga u čitavoj sumi postoji određen broj međusobno izomorfni potprostora, na primer sve ireducibilne reprezentacije sa neke specijalne linije u *Brillouin*-ovoj zoni određuju međusobno izomorfne potprostore, u kojima se vektori razlikuju samo po vrednostima \mathbf{k} . Zbog toga se suma C.2 može formalno zapisati kao suma sa konačnim brojem sabiraka, gde svaki sabirak označava čitavu klasu potprostora, za isti tip \mathbf{k} . Fiksiranjem \mathbf{k} , praktično su fiksirane translacije, tako da je svaki potprostor $V^{\mathbf{k}}$, potprostor tačno određenih translacija. Bilo koja reprezentacija grupe se redukuje u ovako dobijenim potprostorima:

$$D = D_{\mathbf{k}_1} \oplus D_{\mathbf{k}_2} \oplus \dots, \quad (\text{C.3})$$

gde \mathbf{k}_i ima tačno određene vrednosti u specijalnim tačkama *Brillouin*-ove zone, pripada klasi sa koordinatama istog tipa duž specijalnih linija, a za opšte tačke u *Brillouin*-ovoj zoni ima

takođe koordinate istog tipa kao i sve opšte tačke. Da bi sa našla redukcija proizvoljne reprezentacije, u potprostorima $V^{\mathbf{k}}$, potrebno naći projektore na odgovarajuće potprostore: $P_{\mathbf{k}}$. Ovi projektori se nalaze kao projektori za tačno određene vrednosti \mathbf{k} , a dejuju u prostoru matrica reprezentacije $D(g)$, tako da važi relacija:

$$\text{Tr}D_{\mathbf{k}}(g) = \text{Tr}P_{\mathbf{k}}D(g). \quad (\text{C.4})$$

Svaka fiksirana vrednost \mathbf{k} iz ireducibilnog domena *Brillouin*-ove zone suštinski predstavlja celu orbitu \mathbf{k} -ova iz cele zone, te je potpuni projektor za vrednost \mathbf{k} u stvari suma projektora po svim članovima orbite $O_{\mathbf{k}}$:

$$P_{\mathbf{k}} = \sum_{k_i \in O_{\mathbf{k}}} P_{k_i}. \quad (\text{C.5})$$

Delovanjem ovako dobijenih projektora na matrice simetrizovanih kvadrata dobijaju se matrice koje deluju samo u potprostorima sa tačno određenim, poznatim, \mathbf{k} . Fiksiranjem \mathbf{k} tačno je određen skup ireducibilnih reprezentacija koje mogu da se pojave u razlaganju, kao i deo reprezentacije $D(g)$ koji sadrži \mathbf{k} . Simetrizovani kvadrat neke reprezentacije (sa fiksiranim \mathbf{k}) sadrži sve zbirove \mathbf{k} -ova iz orbite fiksiranog \mathbf{k} . Skup zbirova sadrži cele orbite \mathbf{k} -ova iz zone, i to su upravo vrednosti \mathbf{k} koje se pojavljuju u razlaganju. Poznavanjem ovog razlaganja na nivou \mathbf{k} -ova jednoznačno je određeno razlaganje C.3, kao i svi pojektori u jednačini C.5. Ostaje samo da se nađe razlaganje simetrizovanih kvadrata u svakom potprostoru $V^{\mathbf{k}}$.

Kod simorfni grupa faktor grupa DG/T^2 je upravo aksijalna point grupa, te su kod nje karakteri ortogonalni. Znači da bi se dobio skup vektora u $V^{\mathbf{k}}$ koji je linearno nezavisan, potrebno je od generatora aksijalne tačkaste grupe generisati elemente cele grupe. Karakteri su sigurno linearno nezavisni i ortogonalni. Kod nesimorfni grupa se generiše onoliko elemenata koliko je potrebno da dobijeni skup vektora bude linearno nezavisan, u opštem slučaju ovaj skup ne mora biti ortogonalan. U svakom slučaju moguće je izabrati konačan skup elemenata grupe, takav da karakteri ireducibilnih reprezentacija tih elemenata budu linearno nezavisni u klasi potprostora $V^{\mathbf{k}}$.

Ovako dobijeni skupovi predstavljaju bazis u potprostorima $V^{\mathbf{k}}$. Međutim ovako dobijeni bazisi nisu normirani, a ponekad nisu ni ortogonalni, pa se umesto ortonormalizacije (komplikovana zbog postojanja opštih brojeva u vektorima) može redefinisati skalarni proizvod, tako da bazis bude ortonormiran.

Zbog ne(orto)normiranosti bazisa χ , standardni skalarni proizvod bazisnih vektora je: $(\chi_{\mu}, \chi_{\nu}) = g_{\mu\nu}$, gde je $g_{\mu\nu}$ matrični element metričke matrice G . Međutim, uvek je moguće naći biortogonalan bazis bazisu χ , za koji važi: $\chi^{\mu\dagger} \cdot \chi_{\nu} = \delta_{\mu\nu}$. Ako se biortogonalan bazis bazisu χ razvije po bazisu χ , dobija se:

$$\left(\sum_{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu*} \chi_{\lambda}^{\dagger} \right) \cdot \chi_{\nu} = \sum_{\lambda} \alpha_{\lambda}^{\mu*} g_{\lambda\nu}.$$

Desna strana jednačine se može napisati (posle sumiranja po λ) kao:

$$\alpha^{\mu\dagger} G_{\lambda} = \delta_{\mu\nu},$$

gde je G_{λ} , λ -kolona metričke matrice. Odavde se lako vidi da se koeficijenti u razvoju biortogonalnog bazisa dobijaju kao:

$$\alpha^{\mu*} = (0, ..0, 1, 0, \dots)G^{-1},$$

gde vrsta u jednačini ima jedinicu samo na μ -tom mestu, ali ako se gornja relacija zapiše matricno, onda je α^* , matrica u kojoj vrste odgovaraju koeficijentima u razvoju odgovarajućih vektora (μ -ta vrsta daje koeficijente u razvoju μ -tog vektora iz biortogonalnog bazisa). U ovom zapisu vrsta iz poslednje jednačine postaje jedinična matrica, tako da se biortogonalni bazis dobija kao:

$$\chi^\mu = G^{-1}\chi^\dagger,$$

gde je χ matrica čije su kolone komponente vektora χ_ν , dok je ovoga puta χ^μ takođe matrica čije su kolone komponente vektora biortogonalnog bazisa. Kada je nađen biortogonalni bazis, onda se karakteri matrice simetrizovanih kvadrata projektuju u prostor obrazovan vektorima biortogonalnog bazisa (standarni skalarni proizvod), i brojevi pojavljivanja se dobijaju iz matricne relacije:

$$a_\mu = \chi^{\mu\dagger} \cdot \chi^{ssq},$$

gde je a_μ vrsta čije su komponente brojevi pojavljivanja određene reprezentacije u razlaganju, χ^μ je biortogonalan bazis matricno zapisan, dok je χ^{ssq} matrica karaktera simetrizovanih kvadrata. Znači, prvo se pronadū \mathbf{k} -ovi, koji određuju potprostore $V^{\mathbf{k}}$, a samim tim i projektore na te potprostore, zatim se nalazi bazis u potprostorima $V^{\mathbf{k}}$, te njemu biortogonalan bazis. Sa druge strane se projektuju matrice simetrizovanih kvadrata u potprostore $V^{\mathbf{k}}$, nalaze se njihovi karakteri i oni se, konačno, razlažu po biortogonalnom bazisu.

Izložena procedura se može primeniti za razlaganje bilo koje konačno dimenzionalne reprezentacije, na primer za nalaženje *Clebsch-Gordan*-ovih serija.

C.3 Specijalne tačke simetrizovanih kvadrata

Pojedine klase simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija diperiodičnih grupa, pored opšteg razlaganja, za neke specijalne tačke imaju drugačije razlaganje. Ove specijalne tačke se nalaze tako što se ispituje pod kojim uslovima će tačke koje se pojavljuju u razlaganju pasti u neke specijalne tačke, odnosno na specijalne linije u *Brillouin*-ovoj zoni. Zahtevani uslovi daju sisteme jednačina po koordinatama tačaka iz zone, čijim se rešavanjem dobijaju specijalne tačke za simetrizovane kvadrata. Spisak specijalnih tačaka je dat u tabeli C.1, dok je položaj specijalnih tačaka dat na slikama zona 1.2, 1.3, 1.4, 1.5.

C.4 Razlaganje simetrizovanih kvadrata dekompleksifikovanih reprezentacija

Neka je $D^{(\mu)}(g)$ ireducibilna reprezentacija elementa g grupe G , i neka je njen karakter $\chi^{(\mu)}(g)$. Poznato je da je karakter simetrizovanog kvadrata reprezentacije jednak:

$$[\chi^{(\mu)^2}(g)]_+ = \frac{1}{2}(\chi^{(\mu)^2}(g) + \chi^{(\mu)}(g^2)). \quad (\text{C.6})$$

Ako je početna reprezentacija kompleksna (druge ili treće vrste) dekompleksifikovana reprezentacija je direktan zbir reprezentacije i njoj konjugovane reprezentacije: $D^{(\mu)}(g) \oplus D^{(\mu)*}(g)$, dok je karakter dekompleksifikovane reprezentacije jednak zbiru karaktera reprezentacije i karaktera njoj konjugovane reprezentacije: $\chi^{(\mu)}(g) + \chi^{(\mu)*}(g)$. Karakter simetrizovanog

Tabela C.1: Specijalne tačke simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija. U prvoj koloni su dati redni brojevi grupa koje imaju iste *Brillouin*-ove zone, dok su u drugoj date specijalne tačke (linije).

Dg	Specijalne tačke
(1, 4, 5)	—
(2, 3, 6, 7)	$((0, \frac{\pi}{2}), (\frac{-\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\frac{\pi}{2}, \pi), (\pi, \frac{\pi}{2}))$
(8, 10, 11, 13, 24, 29, 30, 31, 32, 35)	$(k1, \frac{\pi}{2})$
(14 – 23, 28, 33, 34, 37 – 48)	$((0, \frac{\pi}{2}), (k1, \frac{\pi}{2}), (\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, k2), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\frac{\pi}{2}, \pi), (\pi, \frac{\pi}{2}))$
(9, 12, 25, 26, 27, 36)	$(\frac{\pi}{2}, k2)$
(49 – 52)	$((\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\pi, \frac{\pi}{2}))$
(53 – 64)	$((k1, \frac{\pi}{2}), (k1, -k1 + \pi), (\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, k2), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\pi, \frac{\pi}{2}))$
(65, 74)	$((\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}), (\frac{2\pi}{3}, \frac{-\pi}{3}), (\pi, 0))$
(68, 70, 79)	$((\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}), (\frac{2\pi}{3}, \frac{-\pi}{3}), (\pi, 0))$
(71, 72, 76, 77, 80)	$((\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}), (\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\frac{2\pi}{3}, 0))$
(66, 73, 75)	$((\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}), (\pi, 0), (k1, -k1 + \pi))$
(67, 69, 78)	$((k1, \frac{-k1}{2} + \frac{\pi}{2}), (k1, -k1 + \pi), (\frac{\pi}{3}, \frac{\pi}{3}), (\frac{\pi}{2}, 0), (\frac{\pi}{2}, \frac{\pi}{2}), (\frac{2\pi}{3}, 0), (\frac{2\pi}{3}, k2))$

kvadrata dekompleksifikovane reprezentacije je, na osnovu jednačine (C.6) jednak:

$$\begin{aligned}
[(\chi^{(\mu)}(g) + \chi^{(\mu)*}(g))^2]_+ &= \frac{1}{2}((\chi^{(\mu)}(g) + \chi^{(\mu)*}(g))^2 + \chi^{(\mu)}(g^2) + \chi^{(\mu)*}(g^2)) \\
&= \frac{1}{2}(\chi^{(\mu)2}(g) + \chi^{(\mu)}(g^2)) + \frac{1}{2}(\chi^{(\mu)2}(g) + \chi^{(\mu)}(g^2)) + \chi^{(\mu)}(g)\chi^{(\mu)*}(g). \tag{C.7}
\end{aligned}$$

Iz jednačine (C.7) se vidi da prvi član odgovara karakteru simetrizovanog kvadrata početne reprezentacije, drugi član je karakter simetrizovanog kvadrata konjugovane reprezentacije, dok je poslednji član karakter direktnog proizvoda $D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\mu)*}(g)$, što se može napisati kao:

$$[(D^{(\mu)}(g) \oplus D^{(\mu)*}(g))^2]_+ = [D^{(\mu)2}(g)]_+ \oplus [D^{(\mu)*2}(g)]_+ \oplus (D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\mu)*}(g)). \tag{C.8}$$

Kada je reprezentacija $D^{(\mu)}(g)$ druge vrste, onda je, po definiciji ona ekvivalentna konjugovanoj, ali ne postoji ekvivalentna realna reprezentacija. U tom slučaju razlaganje dekompleksifikovane reprezentacije je:

$$[(D^{(\mu)}(g) \oplus D^{(\mu)*}(g))^2]_+ = 2[D^{(\mu)2}(g)]_+ \oplus (D^{(\mu)}(g) \otimes D^{(\mu)}(g)) = 3[D^{(\mu)2}(g)]_+ \oplus [D^{(\mu)2}(g)]_-, \tag{C.9}$$

gde je poslednji član antisimetrizovani kvadrat reprezentacije, dok je množenje višestruki direktan zbir.

Za reprezentacije treće vrste jedino uprošćenje je u tome što je razlaganje simetrizovanog kvadrata konjugovane reprezentacije konjugovano razlaganju početne reprezentacije.

Dodatak D

Rezultati — tabele

D.1 Klasifikacija normalnih moda i razlaganje simetrizovanih kvadrata

U tabelama koje slede data su razlaganja dinamičke reprezentacije, polarno vektorske reprezentacije, kao i razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija za pojedine diperioidične grupe. Zbog vrlo kondenzovanog zapisa u zaglavlju tabele, usled mnoštva podataka koji se nalaze u njima, potrebna su detaljna objašnjenja (i samom autoru) oznaka. Svaka tabela u ovom dodatku je podeljena po vertikali na dve table. Desni deo svake tabele sadrži tri vertikalna dela. U prvoj koloni koja je označena sa "IR" se nalaze redni brojevi ireducibilnih reprezentacija. U drugoj koloni koja je označena sa "pv" nalazi se razlaganje polarno vektorske reprezentacije. U trećem delu se nalaze razlaganja dinamičkih reprezentacija za svaku orbitu grupe. Kolone u ovom delu su numerisane tako da svaki broj orbite (prva vrsta) odgovara rednom broju orbite iz tabele B.1. U samoj tabeli svaki broj odgovara broju pojavljivanja odgovarajuće ireducibilne reprezentacije u razlaganju dinamičke reprezentacije. Na primer, ako se na mestu u tabeli, u vrsti označenoj brojem 5 i u koloni označenoj brojem 3, nalazi broj 2, to znači da se u razlaganju dinamičke reprezentacije treće orbite ireducibilna reprezentacija označena brojem 5 javlja dva puta. Razlaganje vibracione reprezentacije se lako dobija oduzimanjem razlaganja polarno vektorske reprezentacije od razlaganja dinamičke reprezentacije za svaku orbitu.

Drugi deo svake tabele (desni) predstavlja razlaganje simetrizovanih kvadrata ireducibilnih reprezentacija. Zbog toga što u opštem slučaju postoji više različitih reprezentacija koje imaju identične simetrizovane kvadrate, svi simetrizovani kvadrati su grupisani u klase. U okviru svake klase su sve reprezentacije koje imaju iste simetrizovane kvadrate, i one, naravno, imaju identična razlaganja. Različite klase su označene velikim latiničnim slovima. Prvih nekoliko klasa u svakoj tabeli odgovara klasama opštih predstavnika ireducibilnih reprezentacija. Takve klase su u zaglavlju označene brojevima reprezentacija koje spadaju u istu klasu. Na primer, oznaka $A=(1-8)$ znači da se u klasi A nalaze ireducibilne reprezentacije numerisane od 1 do 8. Pored ovih razlaganja opštih predstavnika reprezentacija preostala razlaganja predstavljaju razlaganja simetrizovanih kvadrata u specijalnim tačkama C.3. Ovakva razlaganja su u zaglavlju označena opštom klasom, ali kao funkcijom specijalnih tačaka. Na primer, oznaka $G=C(k_1, \pi/2)$ znači da se u koloni označenoj sa G nalazi razlaganje simetrizovanih kvadrata iz klase C ali za specijalnu tačku čije su koordinate $(k_1, \pi/2)$.

Za sve grupe koje imaju red glavne ose manji ili jednak dva (prvih 48 grupa) ireducibilne

reprezentacije u razlaganju simetrizovanih kvadrata se javljaju sa dvostrukim vrednostima talasnih vektora u odnosu na početne reprezentacije. Drugim rečima ako se posmatra, na primer, simetrizovani kvadrat reprezentacije koja se nalazi na $(k_1, 0)$ liniji u Brillouin-ovoj zoni, u razlaganju simetrizovanog kvadrata u svim reprezentacijama koje zavise od k_1 će se javiti vredost $2k_1$. Međutim, u ostalim grupama (sa većim redom glavne ose) se razlaganje znatno komplikuje. Zbog toga je u zaglavlju tabela za ove grupe potrebno uvesti dodatane informacije o vrednostima koje uzima \mathbf{k} u reprezentacijama koje se pojavljuju u razlaganju. Tako, na primer oznaka, "U razlaganju klase J javlja se:" $2irr15 = irr15(2k_1, 2k_2) + irr15(k_1 + k_2, k_1 - k_2)$, znači da se u razlaganju simetrizovanih kvadrata iz klase J reprezentacija označena brojem 15 javlja dva puta, ali za različite vrednosti \mathbf{k} , koje su date kao argument reprezentacija u zbiru. Na isti način su označene bilo koje nestandardne vrednosti \mathbf{k} koje se pojavljuju u razlaganju.

Tabela D.1: **Dg16** A=(1 – 8), B=(9,10) C=(11,12), D=(13,14), E=(15 – 18), F=(19), G=(20 – 23), H=(24), I=(25,26), J=E(0, $\pi/2$), K=G($\pi/2, 0$), L=H($\pi/2, \pi$), M=F($\pi, \pi/2$), N=I($k1, \pi/2$), O=I($\pi/2, k2$) i P=I($\pi/2, \pi/2$).

IR.	pv	1	2	3	4	5	6	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	0	3	2	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	0	3	2	1	0	0	3	0	1	1	1	0	1	0	1	0	0	0	1	1	0	0	0
3	0	3	1	2	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1	1
4	0	3	1	2	0	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	2	3	2	2	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	3	2	2	2	2	0	0	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0
7	1	3	1	1	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	3	1	1	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	0	0	0	0
9	0	6	3	2	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	2	1	0	1
10	0	6	3	4	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
11	0	6	4	3	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	2	0	0	1	1
12	0	6	2	3	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0
13	0	6	3	3	0	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
14	0	6	3	3	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
15	0	6	3	2	1	1	3	0	0	0	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0
16	0	6	3	2	1	1	3	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	6	3	4	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	6	3	4	2	2	3	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
19	0	12	6	6	3	3	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
20	0	6	4	3	2	2	3	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	6	4	3	2	2	3	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0
22	0	6	2	3	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0
23	0	6	2	3	1	1	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
24	0	12	6	6	3	3	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
25	0	12	6	6	3	3	6	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
26	0	12	6	6	3	3	6	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0

Tabela D.2: **Dg18** A=(1–4), B=(5) C=(6), D=(7–10), E=(11–12), F=(13, 14), G=(15–16), H=(17, 18), I=(19), J=E(0, $\pi/2$), K=G($\pi/2, 0$), L=H($\pi/2, \pi$), M=F($\pi, \pi/2$), N=I($k1, \pi/2$), O=I($\pi/2, k2$) i P=I($\pi/2, \pi/2$).

IR.	pv	1	2	3	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P
1	0	3	0	0	1	1	1	0	1	0	1	0	1	1	1	0	0	1	1	1
2	1	3	3	3	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
3	2	3	3	3	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	3	0	0	0	1	1	1	0	1	0	1	1	0	0	1	1	1	1	1
5	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	1	0	1
6	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	1	1
7	0	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
8	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
9	0	3	0	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
10	0	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1
11	0	6	3	3	0	0	0	0	1	1	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0
12	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
14	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
15	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
16	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	0	0	0	1	0	0
17	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
18	0	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0
19	0	12	6	6	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0

Tabela D.6: **Dg53** A=(1-4, 10-13), B=(5, 14), C=(6, 7), D=(8, 9), E=(15, 16), F=(17, 18), G=(19, 20), H=(21), I=G($\pi/2, 0$), J=E($\pi/2, \pi/2$), K=F($\pi, \pi/2$), L=H($k1, \pi/2$), M=H($k1, -k1+\pi$), N=H($\pi/2, k2$). Klasa F: $irr15(k2+\pi, k2+\pi)$, $irr19(2k2, 0)$; H: $2irr15 = irr15(2k1, 0) + irr15(2k2, 0)$, $2irr19 = irr19(k1+k2, k1+k2) + irr19(k1-k2, k1-k2)$, $2irr21 = irr21(2k1, 2k2) + irr21(k1+k2, k1-k2)$; I: $irr15(\pi/2, \pi/2)$; K: $irr15(\pi/2, \pi/2)$; L: $2irr15 = irr15(k1+\pi/2, k1+\pi/2) + irr15(k1-\pi/2, k1-\pi/2)$, $irr17(\pi, 2k1)$, $irr18(\pi, 2k1)$, $irr21(k1+\pi/2, k1-\pi/2)$; M: $2irr15 = irr15(2k1-\pi, 2k1-\pi) + irr15(2k1, 2k1)$, $irr16(2k1, 2k1)$, $irr17(\pi, 2k1-\pi)$, $irr18(\pi, 2k1-\pi)$; N: $2irr15 = irr15(k2+\pi/2, k2+\pi/2) + irr15(k2-\pi/2, k2-\pi/2)$, $irr19(2k2, 0)$, $irr21(k2-\pi/2, k2+\pi/2)$.

IR.	pv	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	0	3	1	1	1	1	1	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	3	2	2	2	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	1	1
3	0	3	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1	0	1	1	1	1	1
4	0	3	1	2	2	1	0	0	1	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	1	0	1	1	1
5	1	6	3	3	3	4	2	2	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	6	3	3	2	3	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1
7	0	6	3	3	4	3	2	1	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	6	3	2	3	3	1	2	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1
9	0	6	3	4	3	3	1	2	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	3	1	2	1	2	0	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
11	0	3	2	1	2	2	0	1	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	3	2	2	1	2	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	3	1	1	2	2	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
14	0	6	3	3	3	2	2	2	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
15	0	12	5	6	6	6	3	3	3	1	1	0	0	0	0	1	1	1	2	1	0	1	2	2	2
16	0	12	7	6	6	6	3	3	3	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
17	0	12	6	7	5	6	3	3	3	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
18	0	12	6	5	7	6	3	3	3	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
19	0	12	6	5	5	6	3	3	2	1	1	0	0	0	0	1	1	1	2	0	0	0	1	2	1
20	0	12	6	7	7	6	3	3	4	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	24	12	12	12	12	6	6	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	1	0	1

Tabela D.7: **Dg55** A=(1-4, 10-13), B=(5, 14), C=(6, 7), D=(8, 9), E=(15, 16), F=(17, 18), G=(19, 20), H=(21), I=G($\pi/2, 0$), J=E($\pi/2, \pi/2$), K=F($\pi, \pi/2$), L=H($k1, \pi/2$), M=H($k1, -k1+\pi$), N=H($\pi/2, k2$). Klasa F: $irr15(k2+\pi, k2+\pi)$, $irr19(2k2, 0)$; H: $2irr15 = irr15(2k1, 0) + irr15(2k2, 0)$, $2irr19 = irr19(k1+k2, k1+k2) + irr19(k1-k2, k1-k2)$, $2irr21 = irr21(2k1, 2k2) + irr21(k1+k2, k1-k2)$; I: $irr15(\pi/2, \pi/2)$; K: $irr15(\pi/2, \pi/2)$; L: $2irr15 = irr15(k1+\pi/2, k1+\pi/2) + irr15(k1-\pi/2, k1-\pi/2)$, $irr17(\pi, 2k1)$, $irr18(\pi, 2k1)$, $irr21(k1+\pi/2, k1-\pi/2)$; M: $2irr15 = irr15(2k1-\pi, 2k1-\pi) + irr15(2k1, 2k1)$, $irr16(2k1, 2k1)$, $irr17(\pi, 2k1-\pi)$, $irr18(\pi, 2k1-\pi)$; N: $2irr15 = irr15(k2+\pi/2, k2+\pi/2) + irr15(k2-\pi/2, k2-\pi/2)$, $irr19(2k2, 0)$, $irr21(k2-\pi/2, k2+\pi/2)$.

IR.	pv	1	2	3	4	5	6	7	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N
1	1	3	2	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	0	3	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	1	1	1
3	0	3	1	2	2	1	0	0	0	1	1	1	0	1	1	1	1	0	1	1	1	1
4	0	3	2	1	1	0	0	0	0	1	0	0	1	0	0	1	0	1	0	1	1	1
5	1	6	3	3	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	6	3	3	4	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1
7	0	6	3	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
8	0	6	3	4	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1	1	0	1
9	0	6	3	2	3	1	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
10	0	3	2	1	2	1	0	1	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
11	0	3	1	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	3	1	1	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
13	0	3	2	2	1	1	1	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
14	0	6	3	3	3	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	1	0
15	0	12	7	6	6	3	2	2	0	0	0	0	1	1	1	2	1	0	1	2	2	2
16	0	12	5	6	6	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
17	0	12	6	5	7	3	1	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
18	0	12	6	7	5	3	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	1	1
19	0	12	6	7	7	4	2	2	0	0	0	0	1	1	1	2	0	0	0	1	2	1
20	0	12	6	5	5	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
21	0	24	12	12	12	6	3	3	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	1	0	1

Tabela D.9: **Dg76** A=(1 - 4), B=(5), C=(6), D=(7, 8), E=(9), F=(10 - 13), G=(14, 15), H=(16, 17), I=(18, 19), J=(20), K=I($\pi/2, 0$), L=I($2\pi/3, 0$), M=G($\pi/3, \pi/3$), N=G($\pi/2, \pi/2$), O=J($k1, -k1/2 + \pi/2$), P=J($k1, -k1 + \pi$), Q=J($2\pi/3, k2$). Klasa G: $2irr14 = irr14(2k1, 2k1) + irr14(k1, k1), irr18(3k1, 0)$; H: $2irr14 = irr14(2k1, 2k1) + irr14(k1, k1), irr18(3k1, 0)$; I: $irr14(k1, k1), 2irr18 = irr18(2k1, 0) + irr18(k1, 0)$; J: $3irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k2, k2) + irr14(k1 + k2, k1 + k2), 3irr18 = irr18(k1 + 2k2, 0) + irr18(2k1 + k2, 0) + irr18(k1 - k2, 0), 3irr20 = irr20(2k1, 2k2) + irr20(k1, k2) + irr20(k1 - k2, k1 + 2k2)$; K: $irr14(\pi/2, \pi/2), irr18(\pi/2, 0)$; L: $irr18(2\pi/3, 0)$; M: $irr14(\pi/3, \pi/3)$; N: $irr14(\pi/2, \pi/2), irr18(\pi/2, 0)$; O: $4irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k1/2 + \pi/2, k1/2 + \pi/2) + irr14(k1/2 - \pi/2, k1/2 - \pi/2) + irr14(k1 + \pi, k1 + \pi), irr15(k1, k1), 2irr18 = irr18(3k1/2 + \pi/2, 0) + irr18(3k1/2 - \pi/2, 0), 2irr20 = irr20(k1/2 + \pi/2, k1/2 - \pi/2) + irr20(3k1/2 + \pi/2, 3k1/2 - \pi/2)$; P: $2irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k1 - \pi, k1 - \pi), 4irr18 = irr18(k1, 0) + irr18(k1 + \pi, 0) + irr18(2k1 - \pi, 0) + irr18(2k1, 0), irr19(k1, 0), 2irr20 = irr20(k1, \pi - k1) + irr20(k1, k1 + \pi)$; Q: $3irr14 = irr14(k2, k2) + irr14(k2 + 2\pi/3, k2 + 2\pi/3) + irr14(k2 - 2\pi/3, k2 - 2\pi/3), irr15(k2, k2), 3irr18 = irr18(k2 + 4\pi/3, 0) + irr18(2k2 + 2\pi/3, 0) + irr18(k2 - 2\pi/3, 0), 2irr20 = irr20(2\pi/3, k2) + irr20(2k2, 4\pi/3)$.

IR.	pv	1	2	3	4	5	6	7	8	9	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
1	0	3	1	1	1	1	1	0	0	0	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	1	3	2	2	1	1	1	1	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	1	1
3	0	3	1	2	2	1	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	3	2	1	2	1	0	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	1	6	3	3	4	2	2	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	6	3	3	2	2	0	1	1	0	0	1	1	0	1	1	1	1	1	2	1	1	1	1	2	2	2
7	0	6	2	3	3	2	1	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1
8	0	6	4	3	3	2	1	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	12	6	6	6	4	2	3	2	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1
10	0	9	4	4	5	3	1	2	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	0	1	1	1	1	0
11	0	9	5	5	5	3	1	3	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	9	4	5	4	3	2	2	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
13	0	9	5	4	4	3	2	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0
14	0	18	8	9	9	6	3	4	3	1	0	0	0	0	0	2	2	1	3	1	0	1	1	4	2	3	
15	0	18	10	9	9	6	3	5	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	
16	0	18	8	9	9	6	3	4	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	18	10	9	9	6	3	5	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	18	9	8	9	6	3	4	2	1	0	0	0	0	0	1	1	2	3	1	2	0	1	2	4	3	
19	0	18	9	10	9	6	3	5	4	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
20	0	36	18	18	18	12	6	9	6	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	2	2	2

Tabela D.10: **Dg77** A=(1-4), B=(5), C=(6), D=(7,8), E=(9), F=(10-13), G=(14,15), H=(16,17), I=(18,19), J=(20), K=I($\pi/2, 0$), L=I($2\pi/3, 0$), M=G($\pi/3, /pi/3$), N=G($\pi/2, \pi/2$), O=J($k1, -k1/2 + \pi/2$), P=J($k1, -k1 + \pi$), Q=J($2\pi/3, k2$). Klasa G: $2irr14 = irr14(2k1, 2k1) + irr14(k1, k1), irr18(3k1, 0)$; H: $2irr14 = irr14(2k1, 2k1) + irr14(k1, k1), irr18(3k1, 0)$; I: $irr14(k1, k1), 2irr18 = irr18(2k1, 0) + irr18(k1, 0)$; J: $3irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k2, k2) + irr14(k1 + k2, k1 + k2), 3irr18 = irr18(k1 + 2k2, 0) + irr18(2k1 + k2, 0) + irr18(k1 - k2, 0), 3irr20 = irr20(2k1, 2k2) + irr20(k1, k2) + irr20(k1 - k2, k1 + 2k2)$; K: $irr14(\pi/2, \pi/2), irr18(\pi/2, 0)$; L: $irr18(2\pi/3, 0)$; M: $irr14(\pi/3, \pi/3)$; N: $irr14(\pi/2, \pi/2), irr18(\pi/2, 0)$; O: $4irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k1/2 + \pi/2, k1/2 + \pi/2) + irr14(k1/2 - \pi/2, k1/2 - \pi/2) + irr14(k1 + \pi, k1 + \pi), irr15(k1, k1), 2irr18 = irr18(3k1/2 + \pi/2, 0) + irr18(3k1/2 - \pi/2, 0), 2irr20 = irr20(k1/2 + \pi/2, k1/2 - \pi/2) + irr20(3k1/2 + \pi/2, 3k1/2 - \pi/2)$; P: $2irr14 = irr14(k1, k1) + irr14(k1 - \pi, k1 - \pi), 4irr18 = irr18(k1, 0) + irr18(k1 + \pi, 0) + irr18(2k1 - \pi, 0) + irr18(2k1, 0), irr19(k1, 0), 2irr20 = irr20(k1, \pi - k1) + irr20(k1, k1 + \pi)$; Q: $3irr14 = irr14(k2, k2) + irr14(k2 + 2\pi/3, k2 + 2\pi/3) + irr14(k2 - 2\pi/3, k2 - 2\pi/3), irr15(k2, k2), 3irr18 = irr18(k2 + 4\pi/3, 0) + irr18(2k2 + 2\pi/3, 0) + irr18(k2 - 2\pi/3, 0), 2irr20 = irr20(2\pi/3, k2) + irr20(2k2, 4\pi/3)$.

IR.	pv	1	2	3	4	5	6	A	B	C	D	E	F	G	H	I	J	K	L	M	N	O	P	Q
1	1	3	2	2	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
2	0	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	1	1	1
3	0	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
4	0	3	1	2	1	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
5	1	6	3	3	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
6	0	6	3	3	1	1	0	0	1	1	0	1	1	1	1	2	1	1	1	1	1	2	2	2
7	0	6	4	3	2	1	1	0	0	0	1	1	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1
8	0	6	2	3	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
9	0	12	6	6	3	2	1	0	0	0	0	1	0	0	0	0	0	0	1	1	0	0	0	1
10	0	9	5	5	3	2	1	0	0	0	0	0	1	0	0	0	0	1	0	1	1	1	1	0
11	0	9	4	4	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
12	0	9	5	4	2	1	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0
13	0	9	4	5	2	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1	0	1	0	0
14	0	18	10	9	5	3	2	0	0	0	0	0	0	2	2	1	3	1	0	1	1	4	2	3
15	0	18	8	9	4	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0	1
16	0	18	10	9	5	3	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
17	0	18	8	9	4	3	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
18	0	18	9	10	5	4	2	0	0	0	0	0	0	1	1	2	3	1	2	0	1	2	4	3
19	0	18	9	8	4	2	1	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	1	0
20	0	36	18	18	9	6	3	0	0	0	0	0	0	0	0	0	3	0	0	0	0	2	2	2

Bibliografija

- [1] E. A. Wood, *80 Diperiodic Groups in Three Dimensions*, Bell System Monograph No.4680 (1964). ([document](#)), [1](#), [1.1.2](#), [1.3](#), [4.3](#), [A](#), [A.1](#), [B.1](#), [B.2](#)
- [2] I. Milošević, B. Nikolić, M. Damnjanović and M. Krčmar, *J. Phys. A: Math. Gen.* **31** (1998) 3625-3648. ([document](#)), [1.2](#), [1.3](#)
- [3] V. Kopsky and D. B. Litvin, D. Litvin and V. Kopsky, *International Tables for Crystallography, Volume D: Subperiodic Groups*, Kluwer Academic Press, to appear. [1](#), [1.1.2](#), [A](#), [A.1](#)
- [4] I. Milošević and M. Damnjanović, *Phys. Rev. B* **47**, 7805-18 (1993). [1.2](#), [3.1](#), [4.4.6](#)
- [5] Hatch D and Stokes H, *Phase Transitions* **7** (1986) 87-149. [1.2](#)
- [6] L. Jansen and M. Boon, *Theory of Finite Groups. Applications in Physics* (Amsterdam: North-Holland 1967). [1.2](#)
- [7] S. L. Altmann, *Induced Representations in Crystals and Molecules* (London: Academic Press 1977). [1.2](#)
- [8] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика I: Механика*, Москва, Наука, 1988. [2.1.1](#)
- [9] E. P. Wigner, *Gött. Nachricht.* 133 (1930). [2.1.2](#)
- [10] M. Damnjanović and I. Milošević, *J. Phys. A* **28** (1995) 1669. [2.2](#)
- [11] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика III: Квантовая Механика*, Москва, Наука, 1989. [3.1](#)
- [12] H. A. Jahn and E. Teller, *Proc. Roy. Soc.* **A161**, 220 (1937). [3.1](#)
- [13] И. Б. Берсукер и В. З. Полингер, *Вибронные взаимодействия в молекулах и кристаллах*, Наука, Москва, 1983. [3.1](#)
- [14] Ivanka Milošević, *Jahn-Teller-ov efekat kod stereoregularnih polimera*, magistarski rad, Fizički fakultet Beograd 1991). [4.4](#), [4.4.1](#)
- [15] M. Sigrist, T.M. Rice, *Z. Phys. B: Condensed Matter* **68**, 9 (1987). [4.4.4](#)
- [16] Л. Д. Ландау и Е. М. Лифшиц, *Теоретическая физика V: Статистическая Физика*, Москва, Наука, 1976. [5](#)

- [17] M. Tinkham, *Introduction to Superconductivity* (McGraw-Hill, Inc. 1996.) 4.4.4
- [18] N. M. Plakida, *High-Temperature Superconductors* (Berlin: Springer-Verlag 1994). 4.4.4
- [19] J. F. Annett, N. Goldenfeld and S. R. Renn, in *Physical Properties of High Temperature Superconductors II*, ed. D. M. Ginsberg (World Scientific, Singapore, 1990). 4.4.4
- [20] E. G. Moshopoulou, Z. Fisk, J. L. Sarrao, J. D. Thompson, *Solid State Communication* (to be publish); 4.4.5
H. Hegger, C. Petrovic, E. G. Moshopoulou, M. F. Hundley, J. L. Sarrao, Z. Fisk and J. D. Thompson, *Phys. Rev. Lett.* **84**, 4986 (2000).
- [21] M. Damnjanović and M. Vujičić, *Phys. Rev. B* **25**, 2321 (1982).
- [22] T. Janssen, *Crystallographic Groups* (Amsterdam: North-Holland 1973).
- [23] S. L. Altmann, *Band Theory of Solids. An introduction from the Point of View of Symmetry* (Oxford: Clarendon Press 1991).
- [24] Ivanka Milošević, *Numeričko korišćenje linijskih grupa pri određivanju invarijantnih potencijala i normalnih moda*, doktorski rad, Fizički fakultet Beograd 1994).
- [25] Milan Damnjanović, *O simetriji u kvantnoj nerelativističkoj fizici*, SFIN VIII(1) 1-90, Beograd 1995.
- [26] A. Burneau, *J. Raman Spect.* **25** 289 (1994).
- [27] Yu. E. Kitaev, M. F. Limonov, A. G. Panfilov, R. A. Evarestov, A. P. Mirgorodsky, *Phys. Rev. B* **49**, 9933 (1994); R. A. Evarestov, Yu. E. Kitaev, M. F. Limonov, A. P. Mirgorodsky, A. G. Panfilov, *Physica C* **235-240**, 1169 (1994).
- [28] Pond R C and Hirth P, *Solid St. Ph.* **47** (1991) 268-366.
- [29] I. Milošević, M. Krčmar, B. Nikolić and M. Damnjanović, *Proceedings of the XXI International Colloquium on Group Theoretical Methods in Physics*, Goslar, Germany (to appear, 1997).
- [30] I. Božović, D. Mitzi, M. Beasley, A. Kapitulnik, T. Geballe, S. Perkowitz, G. L. Carr, B. Lou, R. Sudharsanan and S. S. Yom, *Phys. Rev. B* **36**, 4000 (1987).
- [31] I. Milošević, A. Damjanović and M. Damnjanović, Symmetry oriented research of polymers — PC program *POLSym* and DNA, in *Quantum Mechanical Simulation Methods for Studying Biological Systems*, eds. D. Bicout and M. Field, pages 293-311, Springer-Verlag Berlin Heidelberg & Les Editions de Physique Les Ulis, 1996.