

В.О. ГУБАНОВ, А.П. НАУМЕНКО, М.М. БІЛИЙ, І.С. ДОЦЕНКО,
О.М. НАВОЗЕНКО, М.М. САБОВ, Л.А. БУЛАВІН

Київський національний університет імені Тараса Шевченка
(Вул. Володимирська, 64/13, Київ 01601)

КОРЕЛЯЦІЯ ЕНЕРГЕТИЧНИХ СПЕКТРІВ КОЛИВАЛЬНИХ І ЕЛЕКТРОННИХ ЗБУДЖЕНЬ ТА ЇХНЯ ДИСПЕРСІЯ В ГРАФІТІ ТА ГРАФЕНІ

УДК 539

Досліджено кореляцію коливальних мод, електронних збуджень та їх дисперсійні залежності в одношаровому графені та кристалах графіту. Для інтерпретації таких кореляцій вперше використано методи теорії проєктивних представлень точкових та просторових груп симетрії. Визначено кореляції енергетичних спектрів коливальних та електронних збуджень і умови сумісності незвідних проєктивних представлень в описах квантових станів графену і кристалічного графіту для різних точок їх зон Бріллюена. Для проєктивних представлень всіх проєктивних класів гексагональної системи вперше побудовано стандартні фактор-системи, в тому числі вперше визначено фактор-системи для електронних станів, за допомогою яких вперше знайдено коректні таблиці множення спінорів, тобто таблиці множення елементів в подвійних групах симетрії. На основі зазначеного вище, надано розподіли за типами симетрії коливальних збуджень для всіх точок високої симетрії зон Бріллюена одношарового графену і кристалічного графіту.

Ключові слова: спінорні представлення груп симетрії, фактор-системи, дисперсія елементарних збуджень.

1. Вступ

Вивченню енергетичних спектрів та дисперсії коливальних та електронних колективних збуджень в кристалах та дво- і одноперіодичних наноструктурах завжди приділялась велика увага наукової спільноти, бо такі дослідження відносяться до фундаментальних і мають безперечну як практичну, так і теоретичну цінність. Незважаючи на це, на даний час відсутнє повне уявлення про дисперсію колективних збуджень та їх як теоретичне, так і симетрійне тлумачення навіть для такої широко досліджуваної структури, як кристалічний графіт. Лишаються не встановленими класи проєктивних представлень, за якими перетворюються хвильові функції коливальних та електронних станів в різних точках зони Бріллюена графіту, не визначені зміни характеру виродження енергетичних спектрів збуджень та їх кореляція з відповідними збудженнями одношарового гра-

фену. На сьогодні немає чітких уявлень про коректну побудову фактор-систем, які належать різним проєктивним класам, та про їх зведення до стандартного вигляду, що визначає форму кривих дисперсії та кратності виродження енергетичних станів.

У даній роботі розвинуто методики визначення як самих проєктивних класів і їх змін на границях зони Бріллюена, так і незвідних проєктивних представлень, за якими перетворюються хвильові функції досліджуваних квантових систем. В даній роботі вперше представлено методики побудови фактор-систем, що характеризують певний проєктивний клас, та їх зведення до стандартного вигляду, запропоновано нову класифікацію проєктивних класів для гексагональних структур, а також вперше знайдено коректну таблицю симетрійних перетворень хвильових функцій квантових станів з напівцілим спіном – спінорів. Вперше надано симетрійний аналіз дисперсії коливальних та електронних збуджень для π -зон кристалів графіту і наведено їх кореляції з електронними π -зонами одношарового графену.

© В.О. ГУБАНОВ, А.П. НАУМЕНКО, М.М. БІЛИЙ,
І.С. ДОЦЕНКО, О.М. НАВОЗЕНКО, М.М. САБОВ,
Л.А. БУЛАВІН, 2018

ISSN 0372-400X. Укр. фіз. журн. 2018. Т. 63, № 5

2. Опис системи

Н-поворотів групи $6/mmm(D_{6h})$

Як і в [1, 2] в даній статті для Н-поворотів (поворотних елементів як першого, так і другого роду) групи $6/mmm(D_{6h})$ використані права косокутна система координат з віссю Z , направленою вгору, і віссю Y , направленою праворуч (кут між осями X і Y рівний 120°), і цифрові позначення елементів, для яких дещо змінені їх порядкові номери. Це зроблено для більш зручного представлення “блокового” характеру таблиць, який визначається внутрішньою структурою групи $6/mmm(D_{6h})$, тобто врахуванням того, що група D_{6h} є прямим добутком груп D_6 та $C_i(D_{6h} = D_6 \times C_i)$, а група D_6 , у свою чергу – прямим добутком груп D_3 та $C_2(D_6 = D_3 \times C_2)$. Група D_3 містить інваріантну підгрупу, за якою можна побудувати її фактор-групу, ізоморфну групі C_2 . Відповідно до такого “принципу композиції” “головною” віссю, що визначає символи в позначеннях незвідних представлень в групі D_{6h} , є елемент e_3 – поворот навколо осі 3-го порядку в підгрупі старшого порядку у тому випадку, коли у всіх прямих добутках спочатку “виписується” підгрупа старшого порядку. Зміст Н-поворотів пояснюється на рис. 1. Як і в [1, 2] інверсійним поворотам віддано перевагу перед дзеркальними поворотами.

3. Кристалічні структури, зони Бріллюена і базисні елементи симетрії

На рис. 2, а зображено стандартну елементарну комірку кристалічної ґратки графіту Бернала $\gamma - C$

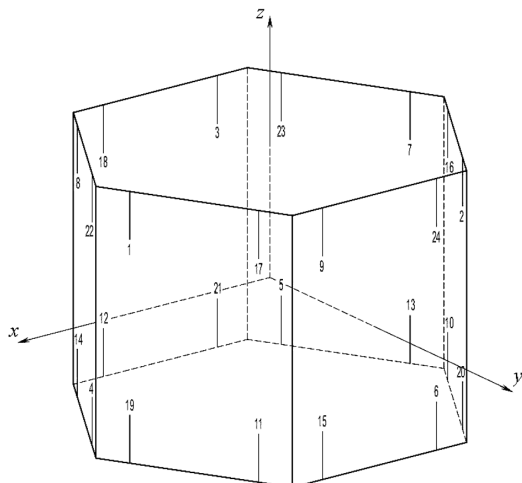


Рис. 1. Призма перепозначених Н-поворотів

[3], яка відповідає наведеному на рис. 2, б стандартному графіку її просторової групи симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, а на рис. 2, в вказано розташування та орієнтацію елементів симетрії точкової групи $6/mmm(D_{6h})$.

На рис. 3 наведено зону Бріллюена кристалів $\gamma - C$ та її точки симетрії, які позначені літерами, що відповідають позначенням Херрінга для гексагональних структур [4], а на рис. 4 – елементарну комірку Вігнера-Зейтца (а) та зону Бріллюена (б) одношарового графену C_{L1} .

На рис. 4, а суцільними лініями схематично зображено елементарну комірку графену C_{L1} , його вектори основних трансляцій \mathbf{a}_1 і \mathbf{a}_2 та вказано використану при розрахунках орієнтацію її елементів симетрії в тривимірному просторі, а пунктиром зображено відповідну орієнтацію векторів оберненої ґратки \mathbf{b}_1 і \mathbf{b}_2 в довільному масштабі та положення вузлів оберненої ґратки в оберненому просторі. На рис. 4, б, навпаки, суцільними лініями зображено вектори оберненої ґратки, а пунктиром – вектори прямої ґратки. Елементарні комірки (комірки Вігнера-Зейтца) графенового шару в реальному просторі (рис. 4, а) та в оберненому просторі (рис. 4, б), де така комірка збігається з першою зоною Бріллюена, виділені сірим фоном. Цікаво, що ці комірки повернуті одна відносно іншої на кут $\pi/2$ (або на кут 30° , зважаючи на те, що поворот на кут 60° в обох випадках є елементом симетрії). На рис. 4, б також позначені точки високої симетрії зони Бріллюена графену – точки K і M . Еквівалентні точки позначені одним або двома штрихами.

Просторова група симетрії кристалічної ґратки графіту $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ є несимморфною і визначається базисними (головними) елементами, які можна вибрати у вигляді:

$$\begin{aligned}
 h_1 &= (0|e), \quad h_2 = (0|c_3), \quad h_3 = (0|c_3^2), \quad h_4 = (0|(u_2)_1), \\
 h_5 &= (0|(u_2)_2), \quad h_6 = (0|(u_2)_3), \quad h_7 = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_2\right), \\
 h_8 &= \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_6^5\right), \quad h_9 = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_6\right), \quad h_{10} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_1\right), \\
 h_{11} &= \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_2\right), \quad h_{12} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_3\right), \quad h_{13} = (0|i), \\
 h_{14} &= (0|ic_3), \quad h_{15} = (0|ic_3^2), \quad h_{16} = (0|i(u_2)_1), \\
 h_{17} &= (0|i(u_2)_2), \quad h_{18} = (0|i(u_2)_3), \quad h_{19} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_2\right), \\
 h_{20} &= \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_6^5\right), \quad h_{21} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_6\right), \quad h_{22} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_1\right), \\
 h_{23} &= \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_2\right), \quad h_{24} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_3\right),
 \end{aligned}$$

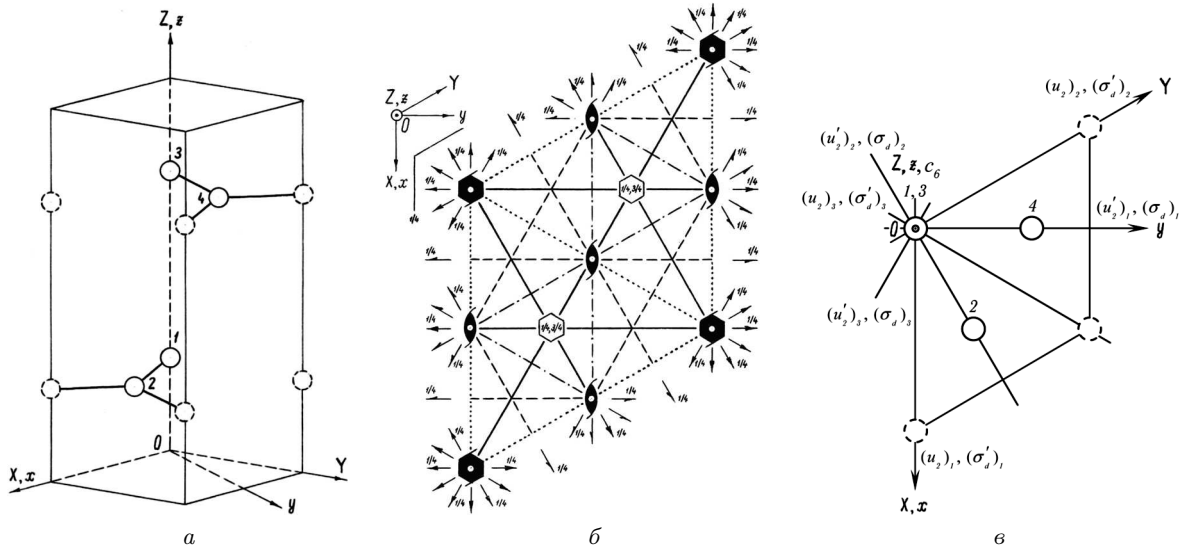


Рис. 2. Структура стандартної елементарної комірки кристала графіту $\gamma-C$ (а), стандартний графік просторової групи симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ (б) і розташування та орієнтація елементів точкової групи симетрії $6/mmm(D_{6h})$ (в). Кругечками вказані положення атомів вуглецю

де \mathbf{a}_1 – основний вектор кристалічної ґратки, направлений вздовж осі OZ (Oz), в той час, як просторова група симетрії кристалічної ґратки одношарового графену $P6/mmm(DG80)$ [5] або триперіодичної групи D_{6h}^1 , графік якої збігається з графіком двоперіодичної просторової групи одношарового графену, є симморфною і всі її “поворотні” елементи – елементи симетрії точкової групи $6/mmm(D_{6h})$ не містять нетривіальних (часткових) трансляцій.

4. Нова класифікація проєктивних класів для проєктивних представлень групи $6/mmm(D_{6h})$ і побудова для них стандартних фактор-систем

Визначення незвідних представлень просторової групи G , що має незвідну зірку $\{\mathbf{k}\}$ хвильового вектора \mathbf{k} , – представлень $D_{\{\mathbf{k}\}}$ зводиться до знаходження проєктивних представлень точкової групи еквівалентних напрямків $F_{\mathbf{k}}$ групи хвильового вектора $G_{\mathbf{k}}$ – підгрупи групи G . Групи $F_{\mathbf{k}}$ є можливими підгрупами точкової групи симетрії еквівалентних напрямків F , що характеризує кристалічний клас кристалічної ґратки. Загальна методика побудови незвідних представлень групи хвильового вектора $D_{\mathbf{k}}$, що називаються також малими представленнями, у вигляді проєктивних пред-

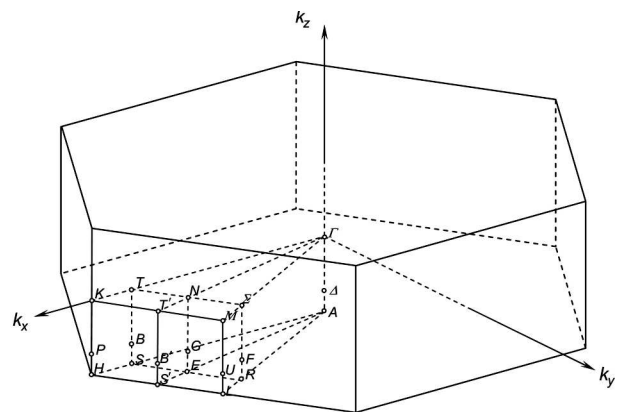


Рис. 3. Зона Бріллюена кристалів графіту $\gamma-C$ та її точки симетрії

ставлень точкових груп еквівалентних напрямків груп хвильових векторів $F_{\mathbf{k}}$, які ізоморфні фактор-групам групи $G_{\mathbf{k}}$ за нескінченною інваріантною підгрупою трансляцій, викладена, в цілому, у [6].

Нагадаємо, що проєктивними, або променевими, представленнями називають представлення, які задовольняють співвідношення

$$D(r_2)D(r_1) = \omega(r_2, r_1)D(r_2r_1), \quad (1)$$

де r_i – “поворотний” (першого або другого роду) елемент групи $F_{\mathbf{k}}$, а $\omega(r_2, r_1)$ – сукупність h^2 , у за-

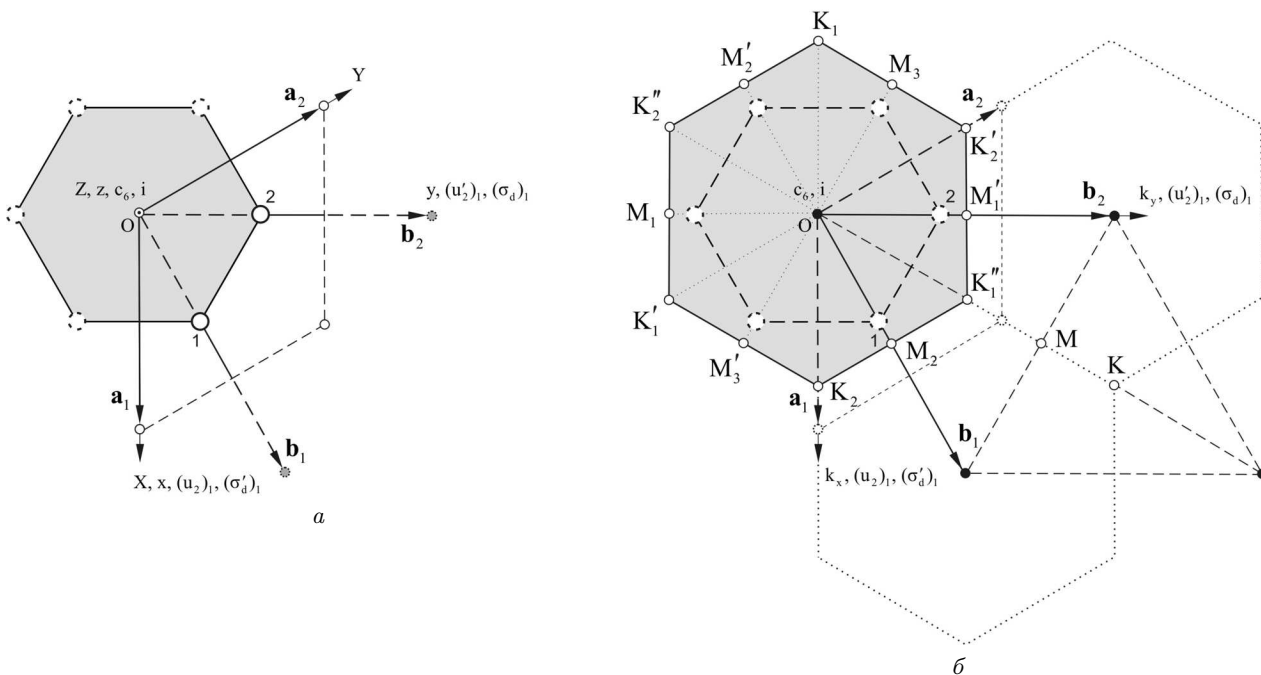


Рис. 4. Елементарні комірки Вігнера–Зейтца (а) та зона Бріллюена одношарового графену CL_1 (б)

гальному випадку, комплексних числових коефіцієнтів (h – порядок групи), що називається фактор-системою, яка має властивості

$$|\omega(r_2, r_1)| = 1 \tag{2}$$

та

$$\omega(r_3, r_2 r_1) \omega(r_2, r_1) = \omega(r_3, r_2) \omega(r_3 r_2, r_1). \tag{3}$$

Якщо $D(r)$ є деяке проєктивне представлення, що належить фактор-системі $\omega(r_2, r_1)$, то будь-яке інше проєктивне представлення

$$D'(r) = \frac{D(r)}{u(r)}, \tag{4}$$

де $u(r)$ – довільна однозначна функція на групі L , а $|u(r)| = 1$, також здійснює проєктивне представлення групи L , але з іншою фактор-системою $\omega'(r_2, r_1)$, тобто

$$D'(r_2) D'(r_1) = \omega'(r_2, r_1) D'(r_2 r_1),$$

де

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

Всі фактор-системи, зв'язані співвідношеннями (5), називають проєктивно-еквівалентними або p -еквівалентними. Сукупність всіх p -еквівалентних

фактор-систем називають класом фактор-систем. Це також відноситься і до відповідних їм проєктивних представлень.

Група $6/mmm$ має 8 класів проєктивних представлень. Вони класифікуються за допомогою системи з трьох коефіцієнтів α, β і γ , які набувають значення 1 і -1 . Кожний з коефіцієнтів визначається співвідношенням

$$[\omega(r_j, r_i)]^{-1} \omega(r_i, r_j) = \frac{\omega(r_i, r_j)}{\omega(r_j, r_i)}$$

для відповідної пари комутуючих елементів r_i і r_j із твірних елементів групи або елементів, що належать різним класам, які містять твірні елементи.

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

$$\alpha = \frac{\omega(a, b)}{\omega(b, a)} = \frac{\omega[(u_2)_1, c_2]}{\omega[c_2, (u_2)_1]},$$

$$\beta = \frac{\omega(a, c)}{\omega(c, a)} = \frac{\omega[(u_2)_1, i]}{\omega[i, (u_2)_1]}$$

$$\text{і} \quad \gamma = \frac{\omega(b, c)}{\omega(c, b)} = \frac{\omega(c_2, i)}{\omega(i, c_2)}.$$

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

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

Незвідні представлення групи хвильового вектора $D_{\mathbf{k}}$ містять нескінченну кількість членів $D_{\mathbf{k}}(h)$ для елементів $h \in G_{\mathbf{k}}$. Кожний елемент h можна представити у вигляді $h = (\alpha + \mathbf{a}|r)$, де r – “поворотний” елемент, сукупність яких утворює групу $F_{\mathbf{k}}$, α – вектор нетривіальної трансляції, котра відповідає поворотному елементу r , і \mathbf{a} – вектор тривіальної трансляції на періоди ґратки Браве.

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

$$D_{\mathbf{k}}(h) = e^{-ik(\alpha+\mathbf{a})}w(r)D(r) \quad (6)$$

і

$$\chi_{D_{\mathbf{k}}(h)} = e^{-ik(\alpha+\mathbf{a})}w(r)\chi_{D(r)}, \quad (7)$$

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

до якого належить фактор-система $\omega(r_2, r_1)$, та $\chi_{D(r)}$ – характери незвідних проективних представлень $D(r)$.

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

$$\omega_{1,\mathbf{k}}(r_2, r_1) = e^{i(\mathbf{k}-r_2^{-1}\mathbf{k})\alpha_1} \quad (8)$$

і для кожної з точок зони Бріллюена не викликає труднощів. Нескладно також визначити проективний клас, якому ця фактор-система належить [6].

Перетворення спінів – хвильових функцій станів з напівцілим спіном характеризуються двозначними представленнями. Для їх побудови часто використовують метод Бете [7], заснований на введенні додаткового абстрактного з геометричної точки зору елемента симетрії q , який комутує зі всіма операціями симетрії і трактується як поворот квантової системи на кут 2π навколо довільної осі \mathbf{l} . Такий елемент змінює знак спіну, який характеризує квантові стани, на протилежний, і тому відповідне представлення групи симетрії і називають двозначним. Наступний крок за методом Бете – побудова подвійної групи, яка містить $2n$ елементів – n “поворотних” елементів симетрії r та n додаткових елементів qr . Далі знаходяться незвідні представлення подвійної групи, з котрих додаткові по відношенню до представлень звичайної групи і є двозначними представленнями звичайної групи симетрії. Така методика побудови двозначних представлень не враховує той факт, що ці представлення повинні бути проективними представленнями звичайної групи симетрії, для побудови яких немає необхідності будувати подвійну абстрактну групу Бете, а потрібно лише знайти фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$, які відображають перетворення хвильових функцій квантових систем з напівцілим спіном.

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

$$\omega_2(r_2, r_1) = \begin{cases} 1 & \text{при } 0 \leq \vartheta < 2\pi, \\ -1 & \text{при } 2\pi \leq \vartheta < 4\pi, \end{cases} \quad (9)$$

де ϑ – кут повороту при обертанні, що відповідає добутку елементів r_2r_1 . Проективний клас, до якого вона належить, також легко встановити [6].

Дамо визначення стандартної фактор-системи для проективних представлень проективного класу K_i .

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

Якщо врахувати, що стандартні фактор-системи для представлень проєктивного класу K_0 повністю складаються з коефіцієнтів, рівних 1, а матриці незвідних представлень, відповідних стандартним фактор-системам і для класу K_0 , де вони співпадають із звичайними векторними представленнями, і для класу K_1 , де їх легко розрахувати за перетвореннями кутового моменту з напівцілим квантовим числом j відомі, то задача побудови незвідних проєктивних представлень класу K_1 повних просторових груп симетрії, зокрема, спінових представлень, зводиться до задачі побудови фактор-систем $\omega_2(r_2, r_1)$, встановлення вигляду стандартних фактор-систем класу K_1 і знаходження функцій $u_2(r)$, які приводять фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ до p -еквівалентного стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1)$.

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

Побудуємо фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$, яка описує перетворення спінових змінних для групи симетрії $6/mmm$ (D_{6h}).

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

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

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

Скориставшись визначаючими співвідношеннями, яким задовольняють вибрані твірні елементи, обчислимо всі значення $\omega_2(r_2, r_1)$. Суттєво, що при

цьому за визначаючі співвідношення повинні бути узяті визначаючі співвідношення для подвійної групи $(6/mmm)'$:

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

При встановленні алгебраїчних виразів для елементів подвійної групи $(6/mmm)'$ через її твірні елементи скористаємося загальним для елементів нескінченної подвійної групи обертань K' співвідношенням [6, 8]:

$$f^{-1}c_1(\alpha)f = c_{f^{-1}(\alpha)}, \quad (12)$$

де $c_1(\alpha)$ – поворот на кут α навколо осі 1 , а f – довільне обертання в подвійній групі обертань з трактуванням одиничної операції, як повороту на кут 4π . Саме це співвідношення дозволяє одержати вказані вище перестановочні визначаючі співвідношення і алгебраїчні вирази для елементів подвійної групи через елементи, що її створюють [8]. Наприклад, для визначення елемента подвійної групи $(u_2)_2$ одержимо $c_3(u_2)_1qc_3^2 = (u_2)_2$, що приводить до виразу:

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

Відзначимо, що в ролі твірних елементів можна скористатися і іншим їх вибором, але це приведе до зміни для них і визначаючих співвідношень. При твірних елементах (11), як легко бачити, для елементів подвійної групи $(6/mmm)'$ одержимо такі їх алгебраїчні вирази: $e = d^0c^0b^0a^0$, $c_3 = d^0c^0b^0a^1$, $c_3^2 = d^0c^0b^0a^2$, $(u_2)_1 = d^0c^0b^1a^0$, $(u_2)_2 = qd^0c^0b^1a^1$, $(u_2)_3 = d^0c^0b^1a^2$, $c_2 = d^0c^1b^0a^0$, $c_2^3 = d^0c^1b^0a^1$, $c_6 = qd^0c^1b^0a^2$, $(u'_2)_1 = d^0c^1b^1a^0$, $(u'_2)_2 = qd^0c^1b^1a^1$, $(u'_2)_3 = d^0c^1b^1a^2$, $i = d^1c^0b^0a^0$, $ic_3 = d^1c^0b^0a^1$, $ic_3^2 = d^1c^0b^0a^2$, $i(u_2)_1 = (\sigma_d)_1 = d^1c^0b^1a^0$, $i(u_2)_2 = (\sigma_d)_2 = qd^1c^0b^1a^1$, $i(u_2)_3 = (\sigma_d)_3 = d^1c^0b^1a^2$, $ic_2 = \sigma_h = d^1c^1b^0a^0$, $ic_2^5 = d^1c^1b^0a^1$, $ic_6 = qd^1c^1b^0a^2$, $i(u'_2)_1 = (\sigma'_d)_1 = d^1c^1b^1a^0$, $i(u'_2)_2 = (\sigma'_d)_2 = qd^1c^1b^1a^1$, $i(u'_2)_3 = (\sigma'_d)_3 = d^1c^1b^1a^2$.

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

Таблиця 1. Фактор-система $\omega_2(\tau_2, \tau_1)$ для групи 6/*ттт* (D_{6h}). У нижній частині таблиці наведені значення функції $u_2(r)$, що приводять фактор-систему $\omega_2(\tau_2, \tau_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_2(\tau_2, \tau_1) \equiv \omega'_1(\tau_2, \tau_1)$ для групи 6/*ттт*

$\omega_2(\tau_2, \tau_1)$	τ_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24
τ_2	e	c_3	c_5	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$
1	e	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$1_{(16)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$
2	c_3	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(4)}$	$1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$-1_{(23)}$
3	c_5^2	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(13)}$	$-1_{(14)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(22)}$
4	$(u_2)_1$	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(20)}$	$-1_{(21)}$
5	$(u_2)_2$	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(15)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(24)}$	$1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(20)}$
6	$(u_2)_3$	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(16)}$	$1_{(17)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$-1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(19)}$
7	c_2	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$1_{(9)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$-1_{(18)}$
8	c_6^5	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$-1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$1_{(17)}$
9	c_6	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(23)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(16)}$
10	$(u_2)_1$	$1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$
11	$(u_2)_2$	$1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(23)}$	$-1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$
12	$(u_2)_3$	$1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$
13	i	$1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$1_{(16)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$
14	ic_3	$1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$
15	ic_5^2	$1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(14)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$
16	$i(u_2)_1$	$1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$
17	$i(u_2)_2$	$1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$-1_{(20)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$
18	$i(u_2)_3$	$1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$1_{(17)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$-1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$
19	ic_2	$1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$-1_{(13)}$	$-1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$
20	ic_6^5	$1_{(20)}$	$-1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$-1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(18)}$	$1_{(16)}$	$1_{(17)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$
21	ic_6	$1_{(21)}$	$1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$-1_{(23)}$	$-1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(17)}$	$1_{(18)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$
22	$i(u_2)_1$	$1_{(22)}$	$-1_{(23)}$	$1_{(24)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(15)}$	$1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(9)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(3)}$
23	$i(u_2)_2$	$1_{(23)}$	$-1_{(24)}$	$1_{(22)}$	$1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(20)}$	$1_{(17)}$	$-1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(14)}$	$1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$
24	$i(u_2)_3$	$1_{(24)}$	$-1_{(22)}$	$1_{(23)}$	$1_{(20)}$	$1_{(21)}$	$-1_{(19)}$	$1_{(18)}$	$-1_{(16)}$	$-1_{(17)}$	$1_{(14)}$	$-1_{(15)}$	$-1_{(13)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$
$u_2(r)$		1	-1	1	i	i	i	i	$-i$	$-i$	-1	-1	-1	1	-1	1	1	i	i	i	i	$-i$	$-i$	-1	-1

елементів групи $6/m\bar{3}m$ (числами у дужках вказані цифрові позначення елементів, які відповідають добуткам r_2r_1).

Слід зазначити, що О.В. Ковальовим [1, 2] була здійснена спроба побудувати цю фактор-систему у вигляді таблиці множення співорів у групі $6/m\bar{3}m$. Проте, цю спробу можна визнати невдалою, оскільки з 576 значень таблиці, одержаної в [1, 2], протилежний знак мають 216 значень. Справа в тому, що у вираз для хвильової функції-спінору для квантової системи з напівцілим спіном входить додатковий множник c [9]. Цей множник може приймати одне з двох значень: $+1$ або -1 [9]. Дійсно, при повороті на кут 2π навколо довільної осі спіор змінює свій знак на протилежний. Якраз в цьому і полягає двозначність матриці представлення для кожного з “поворотних” елементів симетрії. Але така двозначність допустима, без обмеження узагальнення розгляду, тільки для твірних “поворотних” елементів симетрії групи кристалічного класу. Для інших елементів симетрії, які є добутками різних ступенів твірних елементів групи, цей множник вже не може приймати довільне з двох значень – він завжди приймає те значення, яке випливає із співвідношення, що визначає цей елемент. Тобто, довільність у виборі “внутрішнього” знака спінора для твірних елементів групи не впливає на значення коефіцієнтів фактор-системи. В роботах [1, 2], на жаль, знак спінору при перетворенні за допомогою будь-якого “поворотного” елемента групи кристалічного класу визначався за алгебраїчними виразами для геометричного образу елемента в звичайному, однозначному при поворотах, тривимірному просторі, тобто, для кожного із нетвірних “поворотних” елементів групи він визначався довільно.

Правильність розрахунку фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ нашим способом доводиться тим, що, по-перше, вона приводиться перетворенням (5) за допомогою вказаних у нижній частині табл. 1 коефіцієнтів $u_2(r)$, розрахованих за формулами (13.3), (14.18) і (14.19) [6], до p -еквівалентного блоково-симетричного вигляду, який відповідає визначенню стандартної фактор-системи, тобто, фактор-системи $\omega'_2(r_2, r_1)$. По-друге, ці ж коефіцієнти $u_2(r)$ при перетворенні за формулою (4) матриць незвідних проєктивних представлень та їх характеристик, що відповідають стандартній фактор-системі, які можна одержати незалежно

при використанні вказаній у [6] методиці побудови розширеної групи – групи представлень, де вони визначаються за її однозначними незвідними представленнями і є додатковими до звичайних незвідних векторних представлень [6], дають матриці та характери спіорних представлень точно такі, які можна одержати за допомогою подвійної групи за методом Бете. Це доводить, що фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$ дійсно є стандартною фактор-системою проєктивного класу K_1 групи $6/m\bar{3}m$.

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

Оскільки фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ і $\omega'_2(r_2, r_1)$ для групи симетрії $6/m\bar{3}m$ належать проєктивному класу K_1 , то для цієї групи стандартна фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$ співпадає із стандартною фактор-системою $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ [$\omega_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$], де в символі стандартної фактор-системи цифрою в його нижньому індексі в круглих дужках позначений її проєктивний клас. Стандартний вигляд фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$, що позначається $\omega'_2(r_2, r_1)$ [для групи $6/m\bar{3}m$ $\omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$], наведений в табл. 2. В наведеній табл. 2 використана додаткова розбивка елементів симетрії групи $6/m\bar{3}m$ на блоки a , b , c і d по горизонталі та блоки $a(a_1, a_2)$, $b(b_1, b_2)$, $c(c_1, c_2)$, і $d(d_1, d_2)$ по вертикалі. Ця розбивка дозволяє використовувати застосовану нижче компактну форму запису фактор-систем, в якій коефіцієнти, що мають однакові значення в кожному з блоків, замінюються одним значенням одного коефіцієнта, однаковим для всіх коефіцієнтів блоку. В табл. 2 і нижче суцільними лініями виділені контури таких блоків для коефіцієнтів, що мають значення “ -1 ”.

6. Характери незвідних представлень подвійної групи $(6/m\bar{3}m)'$ та незвідних проєктивних представлень групи $6/m\bar{3}m$, що відповідають двозначним проєктивним представленням класу K_1 – спіорним та відповідним стандартній фактор-системі

У табл. 3 наведені характери незвідних представлень подвійної групи $(6/m\bar{3}m)'$ (D'_{6h}), додаткові однозначні незвідні представлення якої (додаткові до звичайних векторних однозначних незвід-

Таблиця 2. Стандартна фактор-система $\omega_2'(v_2, r_1) = \omega_{(1)}'(v_2, r_1)$ для групи б/млн

$\omega_2'(v_2, r_1) = \omega_{(1)}'(v_2, r_1)$		$\omega_{(1)}'(v_2, r_1)$																							
		a						b						c						d					
1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24		
e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
a_1	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
a_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
b_1	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
b_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
c_1	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
c_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
d_1	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
d_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	

Таблиця 3. Характери незвідних представлень подвійної групи $(6/mmm)' (D'_{6h})$

$(6/mmm)'$	(D'_{6h})	e	q	c_3, qc_3^2	c_3^2, qc_3	$3u_2, 3qu_2$	c_2, qc_2	c_6^5, qc_6	c_6, qc_6^5	$3u_2', 3qu_2'$	i	qi	ic_3, qic_3^2	ic_3^2, qic_3	$3\sigma_d, 3q\sigma_d$	$\sigma_h, q\sigma_h$	ic_6^5, qic_6	ic_6, qic_6^5	$3\sigma_d', 3q\sigma_d'$
Γ_1^+	A_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
Γ_1^-	A_1^-	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^+	A_2^+	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
Γ_2^-	A_2^-	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
Γ_3^+	A_3^+	1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	-1
Γ_3^-	A_3^-	1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1
Γ_4^+	A_4^+	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
Γ_4^-	A_4^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1
Γ_5^+	E_1^+	2	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	2	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0
Γ_5^-	E_1^-	2	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	-2	-2	1	1	0	-2	1	1	0
Γ_6^+	E_2^+	2	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	2	2	-1	-1	0	-2	1	1	0
Γ_6^-	E_2^-	2	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	-2	-2	1	1	0	2	-1	-1	0
Γ_7^+	$(E_1')^+$	2	-2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	2	-2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
Γ_7^-	$(E_1')^-$	2	-2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	-2	2	-1	1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
Γ_8^+	$(E_2')^+$	2	-2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	2	-2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
Γ_8^-	$(E_2')^-$	2	-2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	-2	2	-1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
Γ_9^+	$(E_3')^+$	2	-2	-2	2	0	0	0	0	0	2	-2	-2	2	0	0	0	0	0
Γ_9^-	$(E_3')^-$	2	-2	-2	2	0	0	0	0	0	-2	2	2	-2	0	0	0	0	0

дних представлень групи $6/mmm$, що можуть бути одержані з представлень групи $(6/mmm)'$ простим викреслюванням зі всіх співвідношень елементу q) і є двозначними проєктивними або спірними представленнями групи $6/mmm$. Спінорні представлення позначаються символами E_1', E_2' та E_3' в системі позначень Маллікена або символами Γ_7, Γ_8 та Γ_9 в системі позначень Костера, де великою буквою Γ позначена не тільки їх приналежність до певної точкової групи (в даному випадку групи $6/mmm$), а і до співпадаючої з нею групи напрямків групи хвильового вектора точки Γ в кристалах або періодичних наноструктурах. У вигляді проєктивних ці незвідні представлення і їх характеристики можна також одержати згідно з формулами (6) і (7), де $D(r)$ і $\chi_{D(r)}$ – проєктивні представлення та їх характеристики, що відповідають стандартним фактор-системам тих класів, яким належать фактор-системи $\omega(r_2, r_1)$.

Характери незвідних представлень проєктивних класів K_0 (звичайних однозначних або векторних) і K_1 (двозначних проєктивних або спірних) наведені в табл. 4. Легко бачити, що характеристики незвідних проєктивних представлень класу K_1 групи $6/mmm$ збігаються з характеристиками спірних незвідних представлень подвійної групи $(6/mmm)'$.

Характери проєктивних представлень проєктивного класу K_1 , що відповідають стандартній фактор-системі $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$, можна одержати, як відзначалося вище, використовуючи методику побудови групи представлень для групи $6/mmm$ [6] або, що значно простіше, скориставшись формулою (4), підставляючи в неї значення коефіцієнтів $u_2(r)$, які приводять фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$. Характери незвідних проєктивних представлень проєктивних класів K_0 і K_1 групи $6/mmm$, які відповідають стандартним фактор-системам $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$, відповідно, наведені в табл. 5. Характери двовимірних проєктивних представлень, що відповідають стандартній фактор-системі $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ в табл. 5 позначені символом P .

7. Фактор-системи, зумовлені структурою просторових груп симетрії, їх побудова та зведення до стандартного вигляду. Визначення проєктивних класів для коливальних та електронних збуджень в різних точках зони Бріллюена

Тепер побудуємо відповідно до формули (8) фактор-систему $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$, яка визначається властивостями просторової групи симетрії кристала гра-

Таблиця 4. Характери однозначних і двозначних незвідних проективних представлень точки Γ

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$6/mmm(D_{6h})$															
		e	c_3	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u_2'$	i	ic_3	ic_3^2	$3\sigma_d$	σ_h	ic_6^5	ic_6	$3\sigma_d'$
K_0	$\Gamma_1^+ A_1^+$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	$\Gamma_1^- A_1^-$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_2^+ A_2^+$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_2^- A_2^-$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_3^+ A_3^+$	1	1	1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	-1
	$\Gamma_3^- A_3^-$	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1
	$\Gamma_4^+ A_4^+$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	$\Gamma_4^- A_4^-$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1
	$\Gamma_5^+ E_1^+$	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0
	$\Gamma_5^- E_1^-$	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	-2	1	1	0
	$\Gamma_6^+ E_2^+$	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	2	-1	-1	0	-2	1	1	0
	$\Gamma_6^- E_2^-$	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	-2	1	1	0	2	-1	-1	0
K_1	$\Gamma_7^+ (E_1')$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_7^- (E_1')$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_8^+ (E_2')$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_8^- (E_2')$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$\Gamma_9^+ (E_3')$	2	-2	2	0	0	0	0	0	2	-2	2	0	0	0	0	0
	$\Gamma_9^- (E_3')$	2	-2	2	0	0	0	0	0	-2	2	-2	0	0	0	0	0

Таблиця 5. Характери незвідних проективних представлень проективних класів K_0 і K_1 групи $6/mmm$, що відповідають стандартним фактор-системам $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$6/mmm(D_{6h})$															
		e	c_1	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u_2'$	i	ic_3	ic_3^2	$3\sigma_d$	σ_h	ic_6^5	ic_6	$3\sigma_d'$
K_0	$\Gamma_1^+ A_1^+$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	$\Gamma_1^- A_1^-$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_2^+ A_2^+$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_2^- A_2^-$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	$\Gamma_3^+ A_3^+$	1	1	1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	-1	1	1	1	-1
	$\Gamma_3^- A_3^-$	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1
	$\Gamma_4^+ A_4^+$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	$\Gamma_4^- A_4^-$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1	1	1	1	-1
	$\Gamma_5^+ E_1^+$	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0
	$\Gamma_5^- E_1^-$	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	-2	1	1	0
	$\Gamma_6^+ E_2^+$	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	2	-1	-1	0	-2	1	1	0
	$\Gamma_6^- E_2^-$	2	-1	-1	0	-2	1	1	0	-2	1	1	0	2	-1	-1	0
K_1	$(P_1^{(1)})^+$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
	$(P_1^{(1)})^-$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0	-2	1	1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
	$(P_2^{(1)})^+$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
	$(P_2^{(1)})^-$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0	-2	1	1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
	$(P_3^{(1)})^+$	2	2	2	0	0	0	0	0	2	2	2	0	0	0	0	0
	$(P_3^{(1)})^-$	2	2	2	0	0	0	0	0	-2	-2	-2	0	0	0	0	0

фіту і визначає однозначні незвідні проєктивні представлення точки A . Ця фактор-система наведена в табл. 6. Як легко бачити, обчисливши значення коефіцієнтів α , β та γ , побудована фактор-система належить проєктивному класу K_5 . Значення функції на групі $u_{1,A}(r)$, які приводять фактор-систему $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{1,A}(r_2, r_1)$, неважко знайти, використовуючи методику, викладену у [6] (формули 14.33), 10–12]. Ці значення приведені в нижній частині табл. 6. Табл. 7 є стандартною фактор-системою проєктивного класу K_5 – фактор-системою $\omega'_{1,A}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$, яку легко одержати, скориставшись значеннями функції $u_{1,A}(r)$ і формулою (5). Характери однозначних незвідних проєктивних представлень для точки A неважко одержати, знаючи значення функції $u_{1,A}(r)$ і приведені в табл. 8 [6] характери незвідних проєктивних представлень класу K_5 , що відповідають стандартній фактор-системі класу K_5 . Однозначні незвідні проєктивні представлення для точки A наведені в табл. 9 (перші її три незвідні проєктивні представлення).

Легко встановити, що двозначні (спінорні) незвідні проєктивні представлення в точці A відносяться до проєктивного класу K_4 . Дійсно, перемножуючи відповідні значення констант α , β та γ , для нашого випадку знаходимо $K_1 \times K_5 = K_1 \cdot K_5 = K_1 K_5 = K_4$. Стандартна фактор-система класу K_4 – фактор-система $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ ¹, коефіцієнти якої $\omega'_{(4)}(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)\omega'_{(5)}(r_2, r_1)$, а характери двозначних (спінорних) проєктивних представлень в точці A , що відносяться до проєктивного класу K_4 , наведені в табл. 9 (інші її три незвідних проєктивних представлення). Характери цих незвідних проєктивних представлень одержуємо, помноживши значення добутків $u_{1,A}(r)u_2(r)$ на приведені в табл. 8 [6] значення характеристик незвідних проєктивних представлень класу K_4 , що відповідають стандартній фактор-системі класу K_4 .

Тепер неважко встановити й вигляд стандартних фактор-систем інших проєктивних класів групи $6/mmm$. Стандартні фактор-системи для

¹ Неважко бачити, що $\omega'_{(4)}(r_2, r_1) = \omega'_{2,A}(r_2, r_1) = \omega'_{1,A}(r_2, r_1)\omega'_{2,A}(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)\omega'_{(1)}(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)\omega'_{(5)}(r_2, r_1)$, де $\omega'_{2,A}(r_2, r_1)$ – стандартна фактор-система для відповідних їй двозначних проєктивних представлень в точці A .

всіх восьми проєктивних класів групи $6/mmm$ наведені в табл. 10.

За відсутності зовнішніх магнітних полів на хвильові функції станів, і, відповідно, на представлення, накладаються додаткові умови, пов'язані із інваріантністю до інверсії часу. При виконанні цих умов для деяких станів може виникнути додаткове виродження.

8. Симетрія коливань ґраток та електронних π -зон і їх дисперсія для одношарового графену C_{L1} і кристалічного графіту $\gamma - C$

Представлення фундаментальних коливань кристалічних ґраток ($\Gamma_{\text{lat. vibr}}$) та електронних π -зон при $\mathbf{k} = 0$ (Γ_{π}) для одношарового графену C_{L1} та кристалічного графіту $\gamma - C$ визначаються однією й тією самою точковою групою $6/mmm$ (D_{6h}). Для одношарового графену ця група описує симетрію макромолекулярного класу, а для кристалічного графіту $\gamma - C$ – симетрію його кристалічного класу. Термін “макромолекулярний клас”, на відміну від терміну “кристалічний клас”, будемо вживати для групи симетрії еквівалентних напрямків у періодичних наноструктурах з дво- або одноперіодичними нескінченними інваріантними підгрупами трансляції, в той час, як термін “кристалічний клас” – це точкова група симетрії еквівалентних напрямків в триперіодичній структурі – кристалі, де трансляційні елементи симетрії утворюють нескінченну триперіодичну підгрупу. Представлення $\Gamma_{\text{lat. vibr}}$ і Γ_{π} визначаються формулами [13]:

$$\Gamma_{\text{lat. vibr}} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma_{\text{vector}}$$

і

$$\Gamma_{\pi} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma_z, \tag{14}$$

де Γ_{eq} – представлення еквівалентності атомів у точці Γ , Γ_{vector} – представлення полярного вектора \mathbf{r} з компонентами x , y і z . Для визначення Γ_{π} ми використовуємо тільки Γ_z , що є незвідним представленням для вектора, направленою вздовж осі z , оскільки електронні π -зони в графені і графіті формуються електронними орбіталями p_z .

Формули (14) визначають коливальні та електронні представлення також і для елементарних збуджень з $\mathbf{k} \neq 0$ [13]. Так, для будь-якої точки зони Бріллоена періодичних макромолекулярної та кристалічної структур характер представлення

Таблиця 6. Фактор-система $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ для точки A зони Бріллюена кристала графіту просторова група $R6_3/mmc (D_{6h}^4)$. У нижній частині таблиці приведені значення функцій $u_{1,A}(r)$, що приводять фактор-систему $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega_{1,A}(r_2, r_1) \equiv \omega_{(5)}(r_2, r_1)$

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

Таблиця 7. Стандартна фактор-система для точки А зони Брїллюена просторової групи $R6_5$ (тип D_{6h}^4), що збігається зі стандартною фактор-групою проективного класу K_5 точкової групи симетрії $6/mmm$ $\omega_{1,A}(r_2, r_1) \equiv \omega_{(s)}(r_2, r_1)$

$\omega_{1,A}(r_2, r_1) = \omega_{(s)}(r_2, r_1)$		r_1			r_2			d																			
		1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13	14	15	16	17	18	19	20	21	22	23	24		
a	e	c_3^2	c_5^2	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6^5	c_6^5	i	ic_3	ic_3^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	ic_6^5	
	a_1	$i_{(1)}$	$i_{(2)}$	$i_{(3)}$	$i_{(4)}$	$i_{(5)}$	$i_{(6)}$	$i_{(7)}$	$i_{(8)}$	$i_{(9)}$	$i_{(10)}$	$i_{(11)}$	$i_{(12)}$	$i_{(13)}$	$i_{(14)}$	$i_{(15)}$	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$		
	a_2	$i_{(4)}$	$i_{(5)}$	$i_{(6)}$	$i_{(7)}$	$i_{(8)}$	$i_{(9)}$	$i_{(10)}$	$i_{(11)}$	$i_{(12)}$	$i_{(13)}$	$i_{(14)}$	$i_{(15)}$	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	
	b_1	$i_{(7)}$	$i_{(8)}$	$i_{(9)}$	$i_{(10)}$	$i_{(11)}$	$i_{(12)}$	$i_{(13)}$	$i_{(14)}$	$i_{(15)}$	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$
	b_2	$i_{(10)}$	$i_{(11)}$	$i_{(12)}$	$i_{(13)}$	$i_{(14)}$	$i_{(15)}$	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$	$i_{(33)}$	$i_{(34)}$	$i_{(35)}$
	c_1	$i_{(13)}$	$i_{(14)}$	$i_{(15)}$	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$	$i_{(33)}$	$i_{(34)}$	$i_{(35)}$	$i_{(36)}$	$i_{(37)}$	$i_{(38)}$
c_2	$i_{(16)}$	$i_{(17)}$	$i_{(18)}$	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$	$i_{(33)}$	$i_{(34)}$	$i_{(35)}$	$i_{(36)}$	$i_{(37)}$	$i_{(38)}$	$i_{(39)}$	$i_{(40)}$	$i_{(41)}$	
d_1	$i_{(19)}$	$i_{(20)}$	$i_{(21)}$	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$	$i_{(33)}$	$i_{(34)}$	$i_{(35)}$	$i_{(36)}$	$i_{(37)}$	$i_{(38)}$	$i_{(39)}$	$i_{(40)}$	$i_{(41)}$	$i_{(42)}$	$i_{(43)}$	$i_{(44)}$	
d_2	$i_{(22)}$	$i_{(23)}$	$i_{(24)}$	$i_{(25)}$	$i_{(26)}$	$i_{(27)}$	$i_{(28)}$	$i_{(29)}$	$i_{(30)}$	$i_{(31)}$	$i_{(32)}$	$i_{(33)}$	$i_{(34)}$	$i_{(35)}$	$i_{(36)}$	$i_{(37)}$	$i_{(38)}$	$i_{(39)}$	$i_{(40)}$	$i_{(41)}$	$i_{(42)}$	$i_{(43)}$	$i_{(44)}$	$i_{(45)}$	$i_{(46)}$	$i_{(47)}$	

Таблиця 8. Характери незвідних представлень проективних класів K_5 і K_4 групи $6/m\bar{3}m$, що відповідають стандартним фактор-системам цих класів $\omega'_{(5)}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$6/m\bar{3}m(D_{6h})$															
		e	c_1	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u'_2$	i	ic_3	ic_3^2	$3\sigma_d$	σ_h	ic_6^5	ic_6	$3\sigma'_d$
K_5	$P_1^{(5)}$	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
	$P_2^{(5)}$	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	0	0	0	0
	$Q^{(5)}$	4	-2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_4	$P_1^{(4)}$	2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$P_2^{(4)}$	2	2	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	$Q^{(4)}$	4	-2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Таблиця 9. Характери однозначних та двозначних незвідних проективних представлень точки A

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$6/m\bar{3}m(D_{6h})$															
		e	c_1	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u'_2$	i	ic_3	ic_3^2	$3\sigma_d$	σ_h	ic_6^5	ic_6	$3\sigma'_d$
K_5	A_1	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	2	0	0	0	0
	A_2	2	2	2	0	0	0	0	0	0	0	0	-2	0	0	0	0
	A_3	4	-2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
K_4	$A_4 + A_5$	2	-2	2	$2i$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	A_5	2	-2	2	$-2i$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
	A_6	4	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

еквівалентності атомів $\chi_{eq}(R_\alpha)$ для елемента симетрії макромолекулярного та кристалічного класів R_α можна визначити за формулою [13]:

$$\chi_{eq}(R_\alpha) = \sum_j \delta_{R_\alpha \mathbf{r}_j, \mathbf{r}_j} e^{i\mathbf{K}_m \mathbf{r}_j}, \quad (15)$$

де операція R_α переводить атом в еквівалентний, тобто, задовольняє умову:

$$R_\alpha \mathbf{r}_j = \mathbf{r}_j + \mathbf{R}_n, \quad (16)$$

в якій $\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3$ ($n_1, n_2, n_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а \mathbf{a}_i – базисні вектори або вектори основних трансляцій) є вектором кристалічної ґратки або періодичної наноструктури, та

$$R_\alpha^{-1} \mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m, \quad (17)$$

де $\mathbf{K}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3$ ($m_1, m_2, m_3 = 0, \pm 1, \pm 2, \dots$, а \mathbf{b}_j – базисні вектори оберненої ґратки) є вектором оберненої ґратки кристала або періодичної наноструктури. Зрозуміло, що, як це завжди

вважається, базисні вектори прямої та оберненої ґраток зв'язані співвідношеннями:

$$\mathbf{b}_j \mathbf{a}_i = 2\pi \delta_{ij}. \quad (18)$$

Обчислимо розподіл нормальних коливань за типами симетрії для різних точок зон Бріллоена одношарового графену C_{L1} та кристала графіту $\gamma - C$ і визначимо симетрії їх електронних зон, вищих за енергією з валентних зон – валентних π -зон (позначимо їх літерами π) та нижчих за енергією π -зон провідності (позначимо їх літерами π^*).

Точки Γ . Легко бачити, що фактор-групи груп хвильових векторів за інваріантними підгрупами трансляцій і для графену C_{L1} , і для кристала графіту $\gamma - C$ ізоморфні одній і тій самій точковій групі симетрії $6/m\bar{3}m (D_{6h})$. Це відноситься не тільки для груп хвильових векторів у точках Γ графену і кристалічного графіту, а і для всіх, позначених однаковими літерами, точок зон Бріллоена для структур графену і графіту. Незважаючи на

Таблиця 10. Нова класифікація проєктивних класів групи $6/m\bar{3}m(D_{6h})$ та їх стандартні фактор-системи: 1 – клас K_0 , 2 – клас K_1 , 3 – клас K_2 , 4 – клас K_3 , 5 – клас K_4 , 6 – клас K_5 , 7 – клас K_6 , 8 – клас K_7

$K_0(\alpha=1, \beta=1, \gamma=1)$					$K_1(\alpha=-1, \beta=1, \gamma=1)$					$K_2(\alpha=1, \beta=-1, \gamma=1)$					$K_3(\alpha=-1, \beta=-1, \gamma=1)$					
$\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(2)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(3)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	
a	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1
	a_2	1	1	1	1	a_2	1	-1	1	-1	a_2	1	1	-1	-1	a_2	1	-1	-1	1
b	b_1	1	1	1	1	b_1	1	1	1	1	b_1	1	1	1	1	b_1	1	1	1	1
	b_2	1	1	1	1	b_2	1	-1	1	-1	b_2	1	1	-1	-1	b_2	1	-1	-1	1
c	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1
	c_2	1	1	1	1	c_2	1	-1	1	-1	c_2	1	1	-1	-1	c_2	1	-1	-1	1
d	d_1	1	1	1	1	d_1	1	1	1	1	d_1	1	1	1	1	d_1	1	1	1	1
	d_2	1	1	1	1	d_2	1	-1	1	-1	d_2	1	1	-1	-1	d_2	1	-1	-1	1
1					2					3					4					
$K_4(\alpha=1, \beta=1, \gamma=-1)$					$K_5(\alpha=-1, \beta=1, \gamma=-1)$					$K_6(\alpha=1, \beta=-1, \gamma=-1)$					$K_7(\alpha=-1, \beta=-1, \gamma=-1)$					
$\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(5)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(6)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	$\omega'_{(7)}(r_2, r_1)$	a	b	c	d	
a	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1	a_1	1	1	1	1
	a_2	1	1	1	1	a_2	1	-1	1	-1	a_2	1	1	-1	-1	a_2	1	-1	-1	1
b	b_1	1	1	-1	-1	b_1	1	1	-1	-1	b_1	1	1	-1	-1	b_1	1	1	-1	-1
	b_2	1	1	-1	-1	b_2	1	-1	-1	1	b_2	1	1	1	1	b_2	1	-1	1	-1
c	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1	c_1	1	1	1	1
	c_2	1	1	1	1	c_2	1	-1	1	-1	c_2	1	1	-1	-1	c_2	1	-1	-1	1
d	d_1	1	1	-1	-1	d_1	1	1	-1	-1	d_1	1	1	-1	-1	d_1	1	1	-1	-1
	d_2	1	1	-1	-1	d_2	1	-1	-1	1	d_2	1	1	1	1	d_2	1	-1	1	-1
5					6					7					8					

це, характери представлення еквівалентності Γ_{eq} , що входять у формули (10), для позначених однаковими буквами точок зон Бріллюена графену і кристалічного графіту, оскільки останні мають різну структуру, відрізняються.

Характери представлень Γ_{eq} для одношарового графену C_{L1} і кристалічного графіту $\gamma - C$ наведені в табл. 11, де також наведені характери представлень полярного вектора $\Gamma_{\text{vector}} = \Gamma_{\mathbf{r}}$ і представлення Γ_z , що визначає симетрію p_z орбіталі. В табл. 12 наведено розподіл коливально-го представлення $\Gamma_{\text{vibr}} \equiv \Gamma_{\text{lat. vibr}}$, яке легко отримати за формулою (10), представлень для акустичних і оптичних фундаментальних коливальних мод Γ_{ac} і Γ_{opt} , відповідно, і представлення електронних зон Γ_{π} також знайденого за формулою (10), за незвідними представленнями групи $6/m\bar{3}m(D_{6h})$.

Точка А. Фактор-група групи хвильового вектора в точці А за інваріантною підгрупою трансляцій для кристалів графіту $\gamma - C$ також ізоморфна групі $6/m\bar{3}m(D_{6h})$. Зірка хвильового вектора точки А також, як і для точки Γ , складається з одного вектора $\mathbf{k} = -(1/2)\mathbf{b}_1$. Характер проєктивного представлення еквівалентності в точці А – представлення A_{eq} наведено в табл. 11, а розподіл представлень A_{vibr} і A_{π} за незвідними представленнями групи – в табл. 12. В табл. 13 наведені характери однозначних та двозначних незвідних проєктивних представлень точки Δ , проміжної між точками Γ і А. Групою еквівалентних напрямків групи хвильового вектора в точці Δ є група $6mm(C_{6v})$. Зірка хвильового вектора в цій точці містить два промені. Додаткове виродження станів при врахуванні їх інваріантності до інверсії часу відсутнє, на відміну від зумовленого інварі-

Таблиця 11. Характери представлень еквівалентності, полярного вектора (точка Γ) та Γ_z (точка Γ) для точок високої симетрії зон Бріллюена структур одношарового графену C_{L1} та кристалічного графіту $\gamma - C$

Точки Γ
Точкові групи $6/mmm(D_{6h})$
Проективні класи K_0

$6/mmm(D_{6h})$			e	$2c_3$	$3u_2$	c_2	$2c_6$	$3u'_2$	i	$2ic_3$	$3iu_2$	ic_2	$2ic_6$	$3iu'_2$
C_{L1} $\gamma - C$	$\mathbf{k} = 0$	Γ_{eq}	2	2	0	0	0	2	0	0	2	2	2	0
		Γ_{eq}	4	4	0	0	0	4	0	0	4	4	4	0
		Γ_r	3	0	-1	-1	2	-1	-3	0	1	1	-2	1
		Γ_z	1	1	-1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1

Точка A
Точкова група $6/mmm(D_{6h})$
Проективний клас K_5

$6/mmm(D_{6h})$			e	$2c_3$	$3u_2$	c_2	$2c_6$	$3u'_2$	i	$2ic_3$	$3iu_2$	ic_2	$2ic_6$	$3iu'_2$
$\gamma - C$	$\mathbf{k} = -(1/2)\mathbf{b}_1$	A_{eq}	4	4	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0

Точки K
Точкові групи $\bar{6}m2(D_{3h})$
Проективні класи K_0

$\bar{6}m2(D_{3h})$			e	$2c_3$	$3u_2$	ic_2	$2ic_6$	$3iu'_2$
C_{L1} $\gamma - C$	$(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$	K_{eq}	2	-1	0	2	-1	0
		K_{eq}	4	1	0	4	1	0
	$(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	K_{eq}	2	-1	0	2	-1	0
		K_{eq}	4	1	0	4	1	0

Точка H
Точкова група $\bar{6}m2(D_{3h})$
Проективний клас K_1

$\bar{6}m2(D_{3h})$			e	c_3	c_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
$\gamma - C$	$(\mathbf{k}_H)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_1 - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ $(\mathbf{k}_H)_2 = -(1/2)\mathbf{b}_1 + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	H_{eq}	4	1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0

Точки M
Точкові групи $mmm(D_{2h})$
Проективні класи K_0

$mmm(D_{2h})$			e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
C_{L1} $\gamma - C$	$(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_2, (\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_1$ $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$	M_{eq}	2	0	0	2	0	2	2	0
		M_{eq}	4	0	0	4	0	4	4	0
	$(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_3, (\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_2$ $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	M_{eq}	2	0	0	2	0	2	2	0
		M_{eq}	4	0	0	4	0	4	4	0

Точка L
Точкова група $mmm(D_{2h})$
Проективний клас K_5

$mmm(D_{2h})$			e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
$\gamma - C$	$(\mathbf{k}_L)_1 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3)$ $(\mathbf{k}_L)_2 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ $(\mathbf{k}_L)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	L_{eq}	4	0	0	0	0	4	0	0

Таблиця 12. Розподіли коливальних та електронних збуджень для π -зон у точках високої симетрії зон Бріллоена за незвідними проективними представленнями відповідних проективних класів для структур одношарового графену C_{L1} та кристалічного графіту $\gamma - C$

Одношаровий графен, C_{L1}	Кристал графіту, $\gamma - C$
Точки Γ Точкові групи $6/mmm(D_{6h})$ Проективні класи K_0	
$\Gamma_{\text{vib}} = \Gamma_2^+ + \Gamma_3^- + \Gamma_5^+ + \Gamma_6^-$ $\Gamma_{\text{ac}} = \Gamma_3^- + \Gamma_6^-$ $\Gamma_{\text{opt}} = \Gamma_2^+ + \Gamma_5^+$ $\Gamma_{\pi} = \Gamma_2^+ + \Gamma_3^-$	$\Gamma_{\text{vib}} = 2\Gamma_2^+ + 2\Gamma_3^- + 2\Gamma_5^+ + 2\Gamma_6^-$ $\Gamma_{\text{ac}} = \Gamma_3^- + \Gamma_6^-$ $\Gamma_{\text{opt}} = 2\Gamma_2^+ + \Gamma_3^- + 2\Gamma_5^+ + \Gamma_6^-$ $\Gamma_{\pi} = 2\Gamma_2^+ + 2\Gamma_3^-$
Точки K Точкові групи $\bar{6}m2(D_{3h})$ Проективні класи K_0	
$K_{\text{vib}} = K_1 + K_3 + K_5 + K_6$ $K_{\pi} = K_6$	$K_{\text{vib}} = K_1 + K_2 + K_3 + K_4 + 3K_5 + K_6$ $K_{\pi} = K_2 + K_4 + K_6$
Точки M Точкові групи $mmm(D_{2h})$ Проективні класи K_0	
$M_{\text{vib}} = M_1^+ + M_2^+ + M_2^- + M_3^+ + M_3^- + M_4^-$ $M_{\pi} = M_2^+ + M_3^-$	$M_{\text{vib}} = 2M_1^+ + 2M_2^+ + 2M_2^- + 2M_3^+ + 2M_3^- + 2M_4^-$ $M_{\pi} = 2M_2^+ + 2M_3^-$
Точка A Точкова група $6/mmm(D_{6h})$ Проективний клас K_5	
	$A_{\text{vib}} = 2A_1^{(5)} + 2A_3^{(5)}$ $A_{\pi} = 2A_1^{(5)}$
Точка H Точкова група $\bar{6}m2(D_{3h})$ Проективний клас K_1	
	$H_{\text{vib}} = 3H_1^{(1)} + H_2^{(1)} + 2H_3^{(1)}$ $H_{\pi} = H_1^{(1)} + H_3^{(1)}$
Точка L Точкова група $mmm(D_{2h})$ Проективний клас K_5	
	$L_{\text{vib}} = 4L_1^{(5)} + 2L_2^{(5)}$ $L_{\pi} = 2L_1^{(5)}$

антністю до інверсії часу для структур, симетрія яких описується несимморфною просторовою групою $P6_3/mmc$, попарного злипання дисперсійних кривих всіх енергетичних станів у точці A (выводиться на основі аналогічного розгляду для структури вюрциту, наведеному в [6]). На рис. 5 зображено

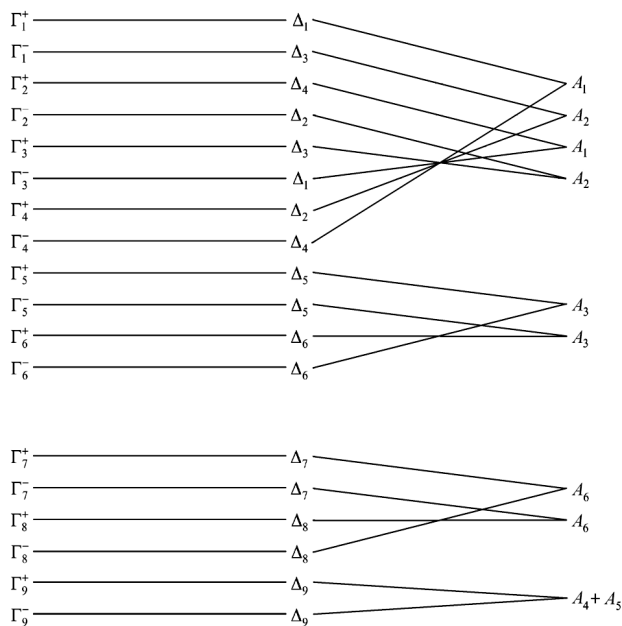


Рис. 5. Діаграма, що визначає сумісність незвідних проективних представлень групи $P6_3/mmc$ в зоні Бріллоена в напрямку $\Gamma - A$

Таблиця 13. Характери однозначних та двозначних незвідних проективних представлень точки Δ

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$6/mmm(D_{6h})$							
		e	c_3	c_3^2	$3\sigma'_r$	c_2	c_6^5	c_6	$3\sigma_r$
K_0	Δ_1	1	1	1	η_k	η_k	η_k	η_k	1
	Δ_2	1	1	1	η_k	$-\eta_k$	$-\eta_k$	$-\eta_k$	-1
	Δ_3	1	1	1	$-\eta_k$	η_k	η_k	η_k	-1
	Δ_4	1	1	1	$-\eta_k$	$-\eta_k$	$-\eta_k$	$-\eta_k$	1
	Δ_5	2	-2	-1	0	$2\eta_k$	$-\eta_k$	$-\eta_k$	0
	Δ_6	2	-1	-1	0	$-2\eta_k$	η_k	η_k	0
K_1	Δ_7	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}\eta_k$	$-\sqrt{3}\eta_k$	0
	Δ_8	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}\eta_k$	$\sqrt{3}\eta_k$	0
	Δ_9	2	-2	2	0	0	0	0	0

діаграму, за якою визначається сумісність незвідних проективних представлень групи $P6_3/mmc$ вздовж лінії $\Gamma - \Delta - A$ в зоні Бріллоена кристалічного графіту.

Точки K . Фактор-групи груп хвильових векторів за нескінченними інваріантними підгрупами

Таблиця 14. Фактор-системи $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$ для точки H кристала графіту (просторова група $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, точкова – $\bar{6}m2(D_{3h})$) (а), та стандартна фактор-система $\omega'_{1,H}(r_2, r_1)$, що відповідає її стандартному вигляду (б). У нижній частині табл. 14, а приведені значення функції $u_{1,H}(r)$, які приводять фактор-систему $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{1,H}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$

$\omega_{1,H}(r_2, r_1)$		r_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
		r_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u'_2)_1$	$i(u'_2)_2$	$i(u'_2)_3$
а	1	e	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$
	2	c_3	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$
	3	c_3^2	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$
	4	$(u_2)_1$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(7)}$	$-l_{(8)}$	$-l_{(9)}$
	5	$(u_2)_2$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(9)}$	$-l_{(7)}$	$-l_{(8)}$
	6	$(u_2)_3$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(8)}$	$-l_{(9)}$	$-l_{(7)}$
	7	ic_2	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$-l_{(1)}$	$-l_{(2)}$	$-l_{(3)}$	$-l_{(4)}$	$-l_{(5)}$	$-l_{(6)}$
	8	ic_6^5	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$-l_{(2)}$	$-l_{(3)}$	$-l_{(1)}$	$-l_{(6)}$	$-l_{(4)}$	$-l_{(5)}$
	9	ic_6	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$-l_{(3)}$	$-l_{(1)}$	$-l_{(2)}$	$-l_{(5)}$	$-l_{(6)}$	$-l_{(4)}$
	10	$i(u'_2)_1$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$
	11	$i(u'_2)_2$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$
	12	$i(u'_2)_3$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$
		$u_{1,H}(r)$	1	1	1	1	1	1	i	i	i	i	i	i

а

$\omega'_{1,H}(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$		r_1	а						б						
		r_2	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	
			e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u'_2)_1$	$i(u'_2)_2$	$i(u'_2)_3$	
а	a_1	1	e	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$
		2	c_3	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$
		3	c_3^2	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$
	a_2	4	$(u_2)_1$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(7)}$	$-l_{(8)}$	$-l_{(9)}$
		5	$(u_2)_2$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(9)}$	$-l_{(7)}$	$-l_{(8)}$
		6	$(u_2)_3$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$-l_{(12)}$	$-l_{(10)}$	$-l_{(11)}$	$-l_{(8)}$	$-l_{(9)}$	$-l_{(7)}$
б	b_1	7	ic_2	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$
		8	ic_6^5	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(2)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$	$l_{(5)}$
		9	ic_6	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(3)}$	$l_{(1)}$	$l_{(2)}$	$l_{(5)}$	$l_{(6)}$	$l_{(4)}$
	b_2	10	$i(u'_2)_1$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$-l_{(4)}$	$-l_{(5)}$	$-l_{(6)}$	$-l_{(1)}$	$-l_{(2)}$	$-l_{(3)}$
		11	$i(u'_2)_2$	$l_{(11)}$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$l_{(8)}$	$-l_{(5)}$	$-l_{(6)}$	$-l_{(4)}$	$-l_{(3)}$	$-l_{(1)}$	$-l_{(2)}$
		12	$i(u'_2)_3$	$l_{(12)}$	$l_{(10)}$	$l_{(11)}$	$l_{(8)}$	$l_{(9)}$	$l_{(7)}$	$-l_{(6)}$	$-l_{(4)}$	$-l_{(5)}$	$-l_{(2)}$	$-l_{(3)}$	$-l_{(1)}$

б

трансляцій в точках K структур одношарового графіту C_{L1} і кристалічного графіту $\gamma - C$ ізоморфні точковій групі $\bar{6}m2(D_{3h})$, яка є точковою групою симетрії еквівалентних напрямків. Зірки груп хвильового вектора в точках K для обох

структур містять по два вектори: для одношарового графіту C_{L1} $(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ і $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$, а для кристалічного графіту $\gamma - C$ $(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ і $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$. Характери проєктивних пред-

Таблиця 15. Фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ для групи $\bar{6}m2(D_{3h})$ (а) та стандартна фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$, що відповідає її стандартному вигляду (б). У нижній частині табл. 15, а приведені значення функції $u_2(r)$, які приводять фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$

$\omega_2(r_2, r_1)$		r_1	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
		r_2	e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u'_2)_1$	$i(u'_2)_2$	$i(u'_2)_3$
1	e	1	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$
2	c_3	1	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$
3	c_3^2	1	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$
4	$(u_2)_1$	1	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$
5	$(u_2)_2$	1	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(8)}$
6	$(u_2)_3$	1	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(7)}$
7	ic_2	1	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$
8	ic_6^5	1	$1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$
9	ic_6	1	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$
10	$i(u'_2)_1$	1	$1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$
11	$i(u'_2)_2$	1	$1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(2)}$
12	$i(u'_2)_3$	1	$1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$
		$u_2(r)$	1	-1	1	i	i	i	i	$-i$	$-i$	-1	-1	-1

a

$\omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$		r_1	a						b					
		r_2	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12
			e	c_3	c_3^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u'_2)_1$	$i(u'_2)_2$	$i(u'_2)_3$
a	a_1	1	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$
		2	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$
		3	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$
	a_2	4	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$
		5	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(8)}$
		6	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$-1_{(12)}$	$-1_{(10)}$	$-1_{(11)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(9)}$	$-1_{(7)}$
b	b_1	7	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$
		8	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$
		9	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(3)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(4)}$
	b_2	10	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(3)}$
		11	$1_{(11)}$	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$
		12	$1_{(12)}$	$1_{(10)}$	$1_{(11)}$	$1_{(8)}$	$1_{(9)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(1)}$

б

ставлень K_{eq} , які для обох структур належать класу K_0 , наведені в табл. 11, а розподіли K_{vibr} і K_π за незвідними представленнями групи $\bar{6}m2(D_{3h})$ – в табл. 12.

Точка H . Фактор-група групи хвильового вектора за нескінченною інваріантною підгрупою транс-

ляцій в точці H структури графіту $\gamma - C$ також ізоморфна точковій групі $\bar{6}m2(D_{3h})$. Зірка групи хвильового вектора містить два вектори: $(\mathbf{k}_H)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_1 - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ і $(\mathbf{k}_H)_2 = -(1/2)\mathbf{b}_1 + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$. В табл. 14, а наведено фактор-систему $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$, розраховану за формулою (8),

Таблиця 16. Характери незвідних проективних представлень групи $\bar{6}m2(D_{3h})$:

однозначних представлень, відповідаючих стандартній фактор-системі (а), двозначних спінових представлень (б) і однозначних представлень, які описують симетрію коливальних і електронних збуджень без врахування спіну в точці H для просторової групи симетрії (групи хвильового вектора точки H), що є підгрупою просторової групи симетрії $P6_3/mmc(D_{6h})$ (в). Штрихи над літерами Γ в символах незвідних проективних представлень означають, що ці представлення є двозначними спіновими

$\bar{6}m2(D_{3h})$			e	c_3	c_3^2	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$
K_1	а	$P_1^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
		$P_2^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
		$P_3^{(1)}$	2	2	2	0	0	0	0	0
	б	$(\Gamma')_1^{(1)} = \Gamma_7 E'_1$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		$(\Gamma')_2^{(1)} = \Gamma_8 E'_2$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		$(\Gamma')_3^{(1)} = \Gamma_9 E'_3$	2	-2	2	0	0	0	0	0
	в	$u_2(r)$	1	-1	1	i	i	$-i$	$-i$	-1
		$H_1^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		$H_2^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		$H_3^{(1)}$	2	2	2	0	0	0	0	0
		$u_{1,H}(r)$	1	1	1	1	i	i	i	i

яка за допомогою значень функції на групі $u_{1,H}(r)$, що вказані в нижній частині табл. 14, а, зводиться до стандартного вигляду $\omega'_{1,H}(r_2, r_1)$, який представлено в табл. 14, б. Легко бачити, що фактор-системи $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{1,H}(r_2, r_1)$ за значеннями коефіцієнтів α, β і γ , які безпосередньо знаходяться з самих фактор-систем, належать до проективного класу K_1 , тобто $\omega'_{1,H}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$.

Стандартну фактор-систему проективного класу K_1 – фактор-систему $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ можна було б отримати також не з фактор-системи $\omega'_{1,H}(r_2, r_1)$, що описує симетрійні властивості просторової групи симетрії кристалічного графіту $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, а з фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$, яка визначається перетвореннями співорів при дії елементів симетрії точкової групи $\bar{6}m2(D_{3h})$, що є групою симетрії еквівалентних напрямків в групі хвильового вектора точки H зони Брілюєна графіту. В табл. 15, а наведена фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ для точкової групи симетрії $\bar{6}m2(D_{3h})$, що одержана за формулою (12) і, як легко бачити, належить проективному класу K_1 . Нижніми індексами біля значень коефіцієнтів фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ в табл. 15, а, що містять цифри у круглих дужках, представлено, як і вище за текстом, таблицю множення елементів тепер вже групи $\bar{6}m2$ (числами у дужках вказані цифрові позначення елементів

для групи $\bar{6}m2$, які відповідають добуткам $r_2 r_1$). В табл. 15, б наведена стандартна фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$, яку одержано при перетворенні за формулою (5) фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$, за допомогою значень функції $u_2(r)$, які приведені в нижній частині табл. 15, а.

Суттєво, що значення коефіцієнтів $u_2(r)$ для елементів, які входять як в групу $\bar{6}m2$, так і в групу $6/mmm$, виявились однаковими. Як і можна було очікувати, стандартні фактор-системи $\omega'_{1,H}(r_2, r_1)$ і $\omega'_2(r_2, r_1)$, які належать одному й тому самому проективному класу K_1 , також співпали, тобто, дійсно, має місце рівність $\omega'_{1,H}(r_2, r_1) = \omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$.

Характери різних p -еквівалентних форм незвідних проективних представлень групи $\bar{6}m2(D_{3h})$, які належать проективному класу K_1 , наведено в табл. 16: незвідних однозначних проективних представлень, що відповідають стандартній фактор-системі $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ (табл. 16, а), незвідних проективних двозначних спінових представлень (табл. 16, б) і незвідних проективних однозначних представлень, що описують симетрію коливальних і електронних збуджень без врахування спіну в точці H для просторової групи симетрії або групи хвильового вектора точки H , що є підгрупою просторової групи симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$,

Таблиця 17. Фактор-системи $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ для точки L зони Бріллюена кристалічного графіту (просторова група $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, точкова – $mmm(D_{2h})$) (а), та стандартна фактор-система $\omega'_{1,L}(r_2, r_1)$, що відповідає її стандартному вигляду (б). У нижній частині табл. 17, а приведені значення функції $u_{1,L}(r)$, які приводять фактор-систему $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{1,L}(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$

$\omega_{1,L}(r_2, r_1)$	r_1	1	2	3	4	5	6	7	8
r_2		e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
1	e	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$
2	$(u_2)_1$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(7)}$
3	c_2	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$
4	$(u'_2)_1$	$1_{(4)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(1)}$	$1_{(8)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(5)}$
5	i	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(4)}$
6	$i(u_2)_1$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$	$1_{(8)}$	$1_{(7)}$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$	$1_{(4)}$	$1_{(3)}$
7	ic_2	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$
8	$i(u'_2)_1$	$1_{(8)}$	$1_{(7)}$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$	$1_{(4)}$	$1_{(3)}$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$
$u_{1,L}(r)$		1	1	1	1	1	1	-1	-1

а

$\omega'_{1,L}(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$		r_1	a		b		c		d		
r_2			1	2	3	4	5	6	7	8	
r_2			e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$	
a	a_1	1	e	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$
	a_2	2	$(u_2)_1$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(7)}$
b	b_1	3	c_2	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$-1_{(7)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(6)}$
	b_2	4	$(u'_2)_1$	$1_{(4)}$	$1_{(3)}$	$-1_{(2)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$
c	c_1	5	i	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(1)}$	$1_{(2)}$	$1_{(3)}$	$1_{(4)}$
	c_2	6	$i(u_2)_1$	$1_{(6)}$	$1_{(5)}$	$-1_{(8)}$	$-1_{(7)}$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$
d	d_1	7	ic_2	$1_{(7)}$	$1_{(8)}$	$1_{(5)}$	$1_{(6)}$	$-1_{(3)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(1)}$	$-1_{(2)}$
	d_2	8	$i(u'_2)_1$	$1_{(8)}$	$1_{(7)}$	$-1_{(6)}$	$-1_{(5)}$	$-1_{(4)}$	$-1_{(3)}$	$1_{(2)}$	$1_{(1)}$

б

(табл. 16, в). Слід зазначити, що представлення в точці H для просторової групи симетрії $P6_3/mmc$, при знаходженні яких не враховується спін квантового збудження, кардинально відрізняються від двозначних спінових представлень (табл. 16, б), але є їм, як і проективним представленням, відповідаючим стандартній фактор-системі проективного класу K_1 (табл. 16, а), проективно еквівалентними (p -еквівалентними). При цьому “носіями” двозначності представлень є набори коефіцієнтів, що визначаються функціями $u_2(r)$, тобто, такими

наборами коефіцієнтів зведення фактор-систем до стандартних виглядів, які відповідають значенням параметра α , рівним -1 .

Точки M . Фактор-групи груп хвильових векторів за нескінченими інваріантними підгрупами трансляцій в точках M структур одношарового графену і кристалічного графіту ізоморфні точковій групі $mmm(D_{2h})$, яка для точок M є точковою групою симетрії еквівалентних напрямків. Зірки груп хвильових векторів в точках M для обох структур містять по три вектори: для одношарового

графену C_{L1} $(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_2$, $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_1$ і $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$, а для кристалічного графіту $\gamma - C$ $(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_3$, $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_2$ і $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$. Характери проєктивних представлень M_{eq} , які для обох структур належать класу K_0 , наведені в табл. 11, а розподіли M_{vibr} і M_{π} за незвідними представленнями групи $mmm(D_{2h})$ – в табл. 12. Побудова характерів незвідних представлень групи $mmm(D_{2h})$ не викликає жодних труднощів, якщо дотримуватися послідовності запису елементів симетрії підгрупи mmm такій, в якій вони записані в групі $6/mmm$, і після кожного парного до інверсії представлення виписувати відповідне непарне.

Точка L. Фактор-група групи хвильового вектора за інваріантною підгрупою трансляцій в точці L кристалічного графіту також ізоморфна точковій групі $mmm(D_{2h})$. Зірка хвильового вектора точки L для структури графіту $\gamma - C$ також містить три вектори $(\mathbf{k}_L)_1 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3)$, $(\mathbf{k}_L)_2 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ і $(\mathbf{k}_L)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$. В табл. 17, а наведено фактор-систему $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$, розраховану за формулою (8), яка за допомогою значень функції на групі $u_{1,L}(r)$, що вказані в нижній частині табл. 17, а, зводиться до стандартного вигляду $\omega'_{1,L}(r_2, r_1)$, який наведено в табл. 17, б. Фактор-системи $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{1,L}(r_2, r_1)$ за значеннями коефіцієнтів α , β і γ , які визначаються з самих фактор-систем, належать до проєктивного класу K_5 , тобто $\omega'_{1,L}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$. Характери незвідних проєктивних представлень для точки L легко отримати, знаючи значення функції $u_{1,L}(r)$ і наведені в табл. 8 [6] характери незвідних проєктивних представлень класу K_5 , що відповідають стандартній фактор-системі класу K_5 . Незвідні проєктивні представлення для точки L легко визначити з табл. 9. Характер проєктивного представлення еквівалентності в точці L – представлення L_{eq} наведено в табл. 11, а розподіл представлень L_{vibr} і L_{π} за незвідними проєктивними представленнями класу K_5 групи mmm – в табл. 12.

На рис. 6 схематично зображено дисперсію енергетичних електронних π -зон кристалів графіту (буквами позначені точки зони Бріллюена, а буквами з індексами – незвідні проєктивні представлення відповідних проєктивних класів). Схематичне зображення дисперсії електронних π -зон на рис. 6 представлено для всіх точок високої симетрії в зоні Бріллюена кристалів графіту. Воно добре

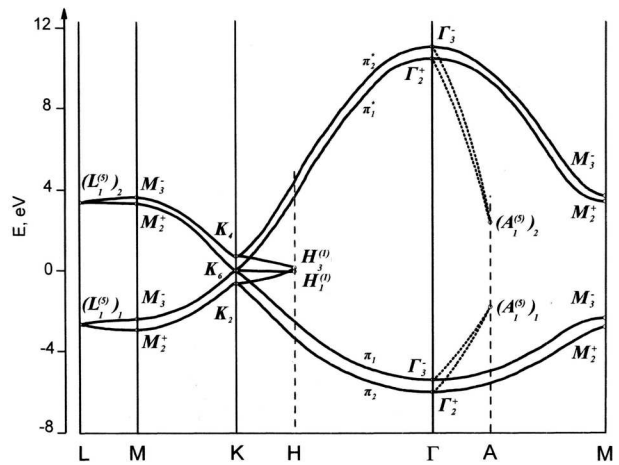


Рис. 6. Дисперсія енергетичних електронних π -зон кристалів графіту (буквами позначені точки зони Бріллюена, а буквами з індексами – незвідні проєктивні представлення відповідних проєктивних класів)

якісно узгоджується з чисельними розрахунками в роботах [14, 15], але, на відміну від них, включає також якісну поведінку дисперсії електронних зон вздовж лінії високої симетрії $\Gamma - \Delta - A$. Крім того, символічні позначення представлень при наведеній вперше в даній роботі класифікації енергетичних станів за незвідними проєктивними представленнями визначених проєктивних класів для різних точок зони Бріллюена представляють точні значення характерів, а, відтак, і матриць незвідних проєктивних представлень, що точно описують симетрію коливальних і електронних збуджень.

9. Висновки

По роботі можна зробити такі висновки:

1. Вперше для точкових груп симетрії винайдено методику побудови коректних таблиць множення спінорів – хвильових функцій квантових станів з напівцілим спіном, тобто, фактично, методику обчислення фактор-систем проєктивного класу K_1 та розроблено процедуру їх зведення до стандартного вигляду.
2. Вперше побудовані стандартні фактор-системи і відповідні їм характери незвідних представлень для всіх проєктивних класів гексагональної групи симетрії $6/mmm(D_{6h})$ та її підгруп.
3. Вперше ідентифіковані класи проєктивних представлень для різних точок зони Бріллюена кристалічного графіту. Для кожної з них побудо-

вані характеристики незвідних проективних представлень, знайдено симетрійний розподіл за незвідними проективними представленнями коливальних збуджень та електронних станів, що визначаються структурою π -зон.

4. Вперше з урахуванням змін проективних класів для різних точок зони Бріллюена надано симетрійний теоретико-груповий опис дисперсії коливальних і електронних збуджень кристалічного графіту та представлено їх кореляції з коливальними та електронними збудженнями одношарового графену.

1. О.В. Ковалев. *Неприводимые представления пространственных групп* (Изд. АН УССР, 1961).
2. О.В. Ковалев. *Неприводимые и индуцированные представления и копредставления федоровских групп. Справочное руководство* (Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1986).
3. J.D. Bernal. The Structure of Graphite. *Proc. Roy. Soc. London A* **106** (740), 749 (1924).
4. C. Herring. Effect on Time-Reversal Symmetry on Energy Band of Crystals. *Phys. Rev.* **52** (4), 361 (1937).
5. E.A. Wood. The 80 Diperic Groups in Three Dimensions. *Bell System Tech. J.* **43** (1), 541 (1964).
6. Г.Л. Бир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1972).
7. H.A. Bethe. Termaufspaltung in Kristallen. *Ann. Physik* **395** (2), 133 (1929).
8. V.O. Gubanov, L.N. Ovander. Development of the Bethe method for the construction of two-valued space group representations and two-valued projective representations of point groups. *Ukr. J. Phys.* **60** (9) 950 (2015).
9. Е. Вигнер. *Теория групп и ее приложения к квантовомеханической теории атомных спектров* (Изд. иностр. лит., 1961).
10. Д.С. Бальчук, М.М. Білий, В.П. Гришук, В.О. Губанов, В.К. Кононов. Симетрія коливальних мод, інваріантність енергетичних станів до інверсії часу і комбінаційне розсіяння світла в кристалах 4Н- та 6Н-SiC. 1.Класифікація енергетичних станів у зонах Бріллюена. *Укр. фіз. журн.* **41** (2), 146 (1996).
11. Т.Л. Ботте, В.А. Губанов, Л.А. Комарова, Н.М. Белый, С.В. Ковригин, И.А. Петруша, А.А. Шульженко. Корреляция колебательных мод и дисперсия фононных возбуждений в слоистых кристаллах графита и графитоподобного нитрида бора. 1.Классификация и корреляция фононных состояний с нулевым квазимпульсом.

Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. *Збірник наукових праць* **5** (2), 287 (2007).

12. В.А. Губанов, Л.А. Комарова, Н.М. Белый, С.В. Ковригин. Корреляция колебательных мод и дисперсия фононных возбуждений в слоистых кристаллах графита и графитоподобного нитрида бора. 2. Дисперсия фононных состояний с ненулевым квазимпульсом и ширина фононных зон. Наносистемы, наноматериалы, нанотехнологии. *Збірник наукових праць* **5** (2), 307 (2007).
13. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio. *Group Theory. Application to the Physics of Condensed Matter* (Springer-Verlag, 2008).
14. E. Doni, G. Pastori Parravicini. Energy Bands and Optical Properties of Hexagonal Boron Nitride and Graphite. *Nuovo Cimento B* **64** (1), 117 (1969).
15. Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. *Электронные состояния и оптические переходы в твердых телах* (Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1982).

Одержано 29.01.18

V.O. Gubanov, A.P. Naumenko,
M.M. Bilyi, I.S. Dotsenko, O.M. Navozenko,
M.M. Sabov, L.A. Bulavin

ENERGY SPECTRA CORRELATION OF VIBRATIONAL AND ELECTRONIC EXCITATIONS AND THEIR DISPERSION IN GRAPHITE AND GRAPHENE

S u m m a r y

The correlation between the vibrational and electron excitation modes in the energy spectra of single-layer graphene and crystalline graphite, as well as the dispersion dependences of those modes, has been studied. The methods of the theory of projective representations of the point and spatial symmetry groups are used for the first time in order to interpret those correlations. The correlations of vibrational and electron excitation spectra and the compatibility conditions for irreducible projective representations in the descriptions of quantum states of graphene and crystalline graphite at various points of their Brillouin zones are determined. For the projective representations of all projective classes belonging to the hexagonal system, standard factor-systems are constructed for the first time. In particular, the factor-systems for electron states are first determined. The results obtained are used to calculate, also for the first time, the correct spinor multiplication tables, i.e. the multiplication tables for elements in double symmetry groups. The developed method is applied to classify all high-symmetry points in the Brillouin zones of single-layer graphene and crystalline graphite with respect to the symmetry type of vibrational excitations.