

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

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

ЕНЕРГЕТИЧНІ СПЕКТРИ ЕЛЕКТРОННИХ ЗБУДЖЕНЬ ТА ЇХНЯ ДИСПЕРСІЯ В ГРАФІТІ І ГРАФЕНІ: ВРАХУВАННЯ ЕЛЕКТРОННОГО СПІНУ ТА СИМЕТРІЇ ДО ІНВЕРСІЇ ЧАСУ

УДК 539

Досліджено дисперсійні залежності електронних збуджень кристалічного графіту і одношарового графену з врахуванням спіну електрона. Визначено кореляції енергетичних спектрів електронних збуджень і, вперше, умови сумісності двозначних незвідних проєктивних представлень, що характеризують симетрію спірних збуджень в зазначених вище структурах, та розподіли спірних квантових станів за проєктивними класами та незвідними проєктивними представленнями для всіх точок високої симетрії у відповідних зонах Бріллюена. За допомогою симетрійних теоретико-групових методів для просторових груп симетрії кристалічного графіту і одношарового графену встановлено існування спин-залежних розщеплень енергетичних електронних спектрів, зокрема, розщеплень π -зон в точках Дірака, величина яких може бути значною, наприклад, для дихалькогенідів перехідних металів такої самої просторової групи симетрії, але є невеликою для кристалічного графіту і одношарового графену, оскільки вона зумовлена малою енергією спин-орбітальної взаємодії для атомів вуглецю і, як наслідок, для вуглецевих структур.

Ключові слова: спірні представлення груп симетрії, фактор-системи, дисперсія електронних збуджень, проєктивні класи та двозначні незвідні проєктивні представлення точкових та просторових груп симетрії.

1. Вступ

В роботі [1] надано симетрійний теоретико-груповий опис дисперсії коливальних та електронних збуджень кристалічного графіту на основі визначення зумовлених просторовою симетрією проєктивних класів представлень для різних точок його зони Бріллюена. Для точок високої симетрії зони Бріллюена кристалічного графіту побудовано незвідні проєктивні представлення, за якими перетворюються хвильові функції його елементарних збуджень. В роботі [1] вказано також кореляції фононних та електронних збуджень графіту та одношарового графену. Для обох структур в ролі електронних зон розглянуто лише π -зони, тобто електронні зони π -орбіталей, що утворюють π -електрони і π -дірки, хвильові функції яких

ортогональні функціям σ -зон sp^2 -гібридизованих σ -орбіталей. При цьому не враховувалась спір-орбітальна взаємодія для електронних станів, яка для π -зон у вуглецевих структурах дійсно є незначною [2].

Оскільки симетрія кристалічної ґратки графіту Бернала [3] описується просторовою групою $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$, яка є також просторовою групою симетрії кристалічних ґраток гексагонального нітриду бору (BN) і гексагональних політипів $2H_a$ і $2H_c$ дихалькогенідів перехідних металів (MoS_2 , $MoSe_2$, WS_2 , WSe_2 , TeS_2 , $TeSe_2$), нам здавалось важливим у даній роботі визначити якісний характер впливу електронного спіну на структуру π -зон графіту та інших сполук, що кристалізуються в ґратках, просторова симетрія яких, як і для кристалів графіту, описується просторовою групою симетрії $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$.

Важливим також є більш детальний, ніж в роботі [1], розгляд впливу симетрії до інверсії часу для

© В.О. ГУБАНОВ, А.П. НАУМЕНКО, М.М. БІЛИЙ,
І.С. ДОЦЕНКО, М.М. САБОВ, М.С. ЯХНЕНКО,
Л.А. БУЛАВІН, 2020

ISSN 2071-0194. Укр. фіз. журн. 2020. Т. 65, № 4

339

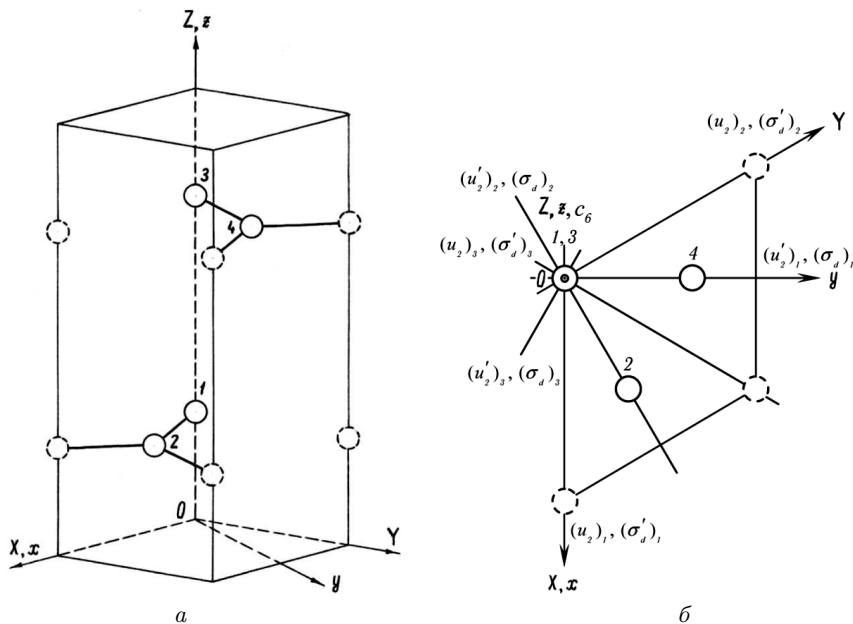


Рис. 1. Структура стандартної елементарної комірки кристала графіту $\gamma - C$ (а) і розташування та орієнтація елементів точкової групи симетрії $6/mmm (D_{6h})$ (б). Кružечками вказані положення атомів вуглецю (взято з роботи [1])

елементарних збуджень в ґратках із просторовою симетрією $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$.

2. Структура стандартних елементарних комірок графіту і одношарового графену, зони Бріллюена і базисні елементи симетрії

На рис. 1, а зображено стандартну елементарну комірку кристалічної ґратки графіту Бернала, $\gamma - C$ [3], яка відповідає стандартному графіку її просторової групи симетрії $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$ [4], а на рис. 1, б вказано розташування та орієнтацію елементів симетрії точкової групи $6/mmm (D_{6h})$.

На рис. 2 наведено зону Бріллюена кристалів $\gamma - C$ та її точок симетрії, які позначені літерами, що відповідають позначенням Херрінга для гексагональних структур [5, 6], а на рис. 3 – елементарну комірку Вігнера–Зейтца (а) та зону Бріллюена (б) одношарового графену $C_{L,1}$.

На рис. 3, а суцільними лініями схематично зображено елементарну комірку графену $C_{L,1}$, 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 базисних векторів оберненої ґратки \mathbf{b}_1 і \mathbf{b}_2 в довільному масштабі та положення вузлів оберненої ґратки в

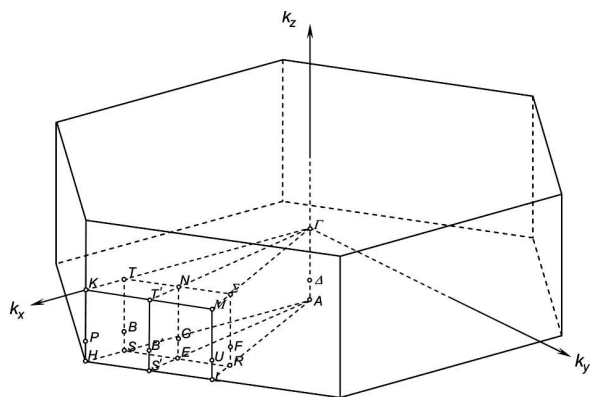


Рис. 2. Зона Бріллюена кристалів графіту $\gamma - C$ та її точки симетрії (взято з роботи [1])

оберненому просторі. На рис. 3, б, навпаки, суцільними лініями зображено вектори оберненої ґратки, а пунктирними – вектори прямої ґратки. Елементарні комірки (комірки Вігнера–Зейтца) графенового шару в реальному просторі (рис. 3, а) та оберненому просторі (рис. 3, б), де така комірка збігається з першою зоною Бріллюена, виділені сірим фоном. На рис. 3, б також позначені точки високої симетрії зони Бріллюена графену – точки Γ , K і M . Еквівалентні точки позначені одним або двома штрихами.

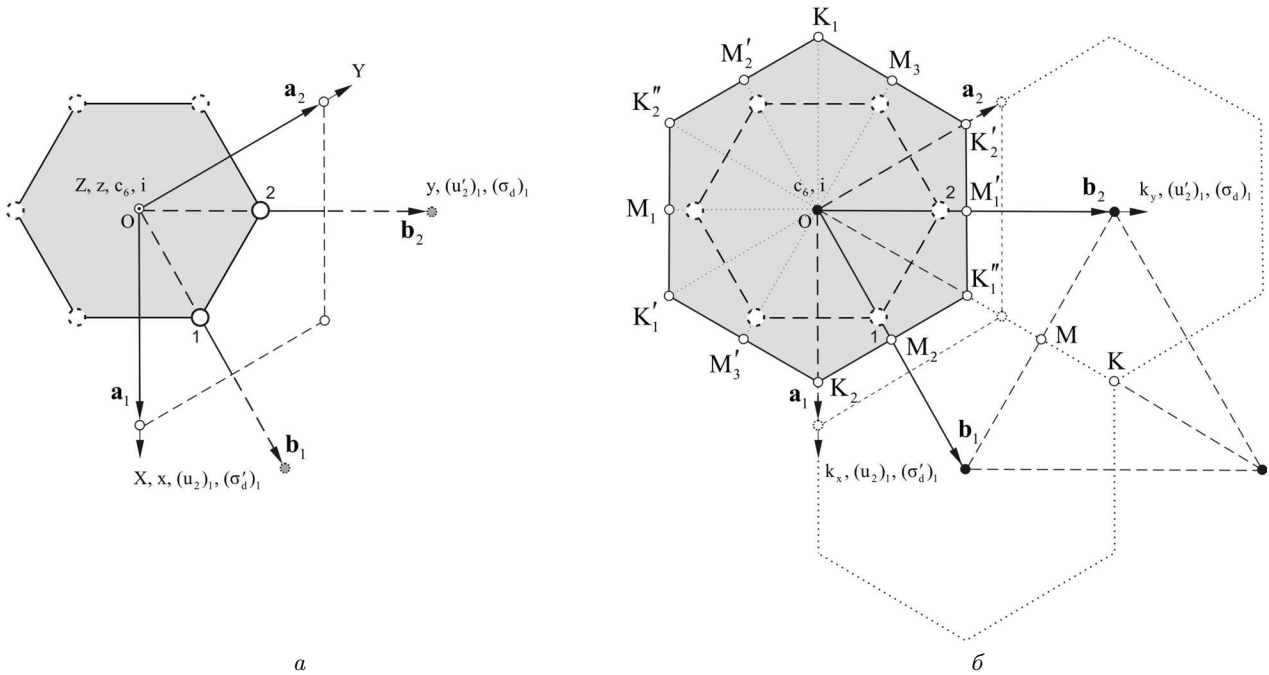


Рис. 3. Елементарна комірка Вігнера–Зейтца (а) та зона Бріллюена (б) одношарового графену $C_{L,1}$ (взято з роботи [1])

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

$$h_1 = (0|e), h_2 = (0|c_3), h_3 = (0|c_3^2), h_4 = (0|(u_2)_1),$$

$$h_5 = (0|(u_2)_2), h_6 = (0|(u_2)_3), h_7 = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_2\right),$$

$$h_8 = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_6^5\right), h_9 = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| c_6\right), h_{10} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_1\right),$$

$$h_{11} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_2\right), h_{12} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| (u'_2)_3\right), h_{13} = (0|i),$$

$$h_{14} = (0|ic_3), h_{15} = (0|ic_3^2), h_{16} = (0|i(u_2)_1),$$

$$h_{17} = (0|i(u_2)_2), h_{18} = (0|i(u_2)_3), h_{19} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_2\right),$$

$$h_{20} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_6^5\right), h_{21} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| ic_6\right), h_{22} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_1\right),$$

$$h_{23} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_2\right), h_{24} = \left(\frac{\mathbf{a}_1}{2} \middle| i(u'_2)_3\right),$$

де \mathbf{a}_1 – основний вектор кристалічної ґратки, направлений вздовж осі OZ (Oz), в той час, як двоперіодична просторова група симетрії кристалічної ґратки одношарового графену $P6/mmm (DG80)$ [7], графік якої збігається

з графіком триперіодичної просторової групи $P6/mmm (D_{6h}^1)$, є симорфною і всі її “поворотні” елементи – елементи симетрії точкової групи $6/mmm (D_{6h})$ – не містять нетривіальних (часткових) трансляцій.

3. Вплив електронного спіну та симетрії до інверсії часу на енергетичні спектри елементарних збуджень

Розглянемо якісний характер впливу електронного спіну та симетрії до інверсії часу на енергетичні спектри елементарних збуджень кристалічного графіту і їхню дисперсію для точок вздовж ліній Γ – Δ – A , K – P – H і M – U – L його зони Бріллюена та на енергетичні спектри і дисперсію електронних π -зон одношарового графену в точках Γ , K і M .

3.1. Лінія Γ – Δ – A кристалічного графіту і точка Γ одношарового графену

3.1.1. Точки Γ

В точках Γ фактор-групи груп хвильових векторів за інваріантними підгрупами трансляцій і для кристала графіту γ – C , і для одношарового графену $C_{L,1}$ ізоморфні одній і тій самій точковій групі

симетрії $6/mmm (D_{6h})$. Ця точкова група є групою симетрії еквівалентних напрямків в обох структурах: в кристалах графіту $\gamma - C$, де вона є групою кристалічного класу, і в одношаровому графені $C_{L,1}$, де вона характеризує симетрію макромолекулярного класу [1].

Хвильові функції коливальних елементарних збуджень в точках $\Gamma - \Gamma_{\text{vib}}$ ($\Gamma_{\text{lat.vib}}$) – і для кристалічного графіту, і для одношарового графену, перетворюються за однозначними векторними незвідними представленнями точкової групи $6/mmm (D_{6h})$, якими є незвідні представлення проективного класу K_0 цієї групи. Представлення цих збуджень визначаються за формулою [8]:

$$\Gamma_{\text{vib.}} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma_{\text{vector}}, \quad (1)$$

де Γ_{eq} – представлення еквівалентності атомів у точці Γ (методика визначення характерів представлень еквівалентності атомів і результати їх обчислень для точок зон Бріллюена високої симетрії графіту і одношарового графену наведені в [1]), Γ_{vector} – представлення полярного вектора \mathbf{r} з компонентами x, y і z .

З електронних збуджень в точках Γ будемо розглядати тільки збудження електронних π -зон, хвильові функції яких ортогональні хвильовим функціям sp^2 -гібридизованих σ -зон (зон sp^2 -гібридизованих σ -електронів). Для визначення представлень Γ_{π} для станів без врахування спіну (при малій величині спин-орбітальної взаємодії) ми в роботі [1] використовували формулу, в яку крім представлення Γ_{eq} входить тільки представлення Γ_z :

$$\Gamma_{\pi} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma_z, \quad (2)$$

де Γ_z – представлення, що є незвідним представленням в групі $6/mmm (D_{6h})$ для вектора, направленою вздовж осі z , оскільки електронні π -зони в графіті і в графені формуються невиродженими електронними орбіталями p_z .

Для визначення електронного представлення π -зон з урахуванням спіну електрона, Γ'_{π} , ми повинні використовувати формулу

$$\Gamma'_{\pi} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma'_z, \quad (3)$$

в якій представлення електронної π -орбіталі з урахуванням спіну (позначимо його Γ'_z) знаходиться

за формулою

$$\Gamma'_z = \Gamma_z \otimes D_{1/2}^+, \quad (4)$$

де $D_{1/2}^+$ – парне двовимірне (спінорне) представлення групи обертань для квантового числа повного моменту електрона $j = 1/2$, характери для повороту на кут φ якого визначаються за формулою [9]:

$$\chi_j(c_{\varphi}) = \frac{\sin[(j + 1/2)\varphi]}{\sin(\varphi/2)}. \quad (5)$$

В табл. 1 для групи $6/mmm (D_{6h})$ наведені характери незвідних представлень проективних класів K_0 , де вони описують симетрію коливальних та електронних збуджень в точках Γ кристалічного графіту $\gamma - C$ та одношарового графену $C_{L,1}$ без врахування спіну і збігаються із звичайними однозначними векторними, та K_1 , де вони, як показано у [1], характеризують симетрію електронних станів з урахуванням спіну і є двозначними спінорними.

В табл. 2 для точок Γ в зонах Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ і одношарового графену $C_{L,1}$ представлено характери представлень еквівалентності, Γ_{eq} , та характери представлень, що характеризують симетрію електронних π -зон з урахуванням електронного спіну (π' -зон), $\Gamma'_{\pi} = \Gamma_{\text{eq}} \otimes \Gamma'_z$, наведено характери представлень $\Gamma_z, D_{1/2}^+$ і $\Gamma'_z = \Gamma_z \otimes D_{1/2}^+$, а також відповідних проективних представлень для інших точок високої симетрії в зонах Бріллюена цих структур. Розподіли електронних збуджень кристалічного графіту та одношарового графену для точок високої симетрії в зонах Бріллюена за незвідними двозначними спінорними проективними представленнями показано в табл. 3. У цій же таблиці для порівняння наведено розподіли електронних збуджень за незвідними проективними представленнями для π -зон без урахування електронного спіну.

В табл. 3 нами для чіткого виділення саме двозначних спінорних представлень у різних проективних класах для різних точок зон Бріллюена застосована така система позначень незвідних проективних представлень: буквою вказано точку зони Бріллюена структури, буквою із штрихом позначені двозначні спінорні (відповідно, буквою без штриха – звичайні однозначні векторні) представлення, цифрою в круглих дужках у верхньому індексі позначено проективний клас, цифрою

Таблиця 1. Характери однозначних і двозначних незвідних проективних представлень точок Γ структур кристалічного графіту $\gamma - C$ та одношарового графену $C_{L,1}$

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	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$
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

у нижньому внутрішньому індексі вказано порядковий номер незвідного представлення в даному проективному класі, а значками “+” і “-” у зовнішньому верхньому індексі позначено парність представлення. Очевидно, що в наших позначеннях $((\Gamma')_1^{(1)})^+ \equiv \Gamma_7^+$, а $((\Gamma')_2^{(1)})^- \equiv \Gamma_8^-$, де Γ_7^+ , Γ_8^- – спірні представлення в загальноприйнятій системі позначень, що застосовані нами, зокрема, в позначеннях двозначних спірних представлень в табл. 1. Додатково цифрою зовнішнього нижнього індексу може бути вказано порядковий номер представлення, якщо таких представлень декілька.

3.1.2. Точка A

Зірка хвильового вектора точки A зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ також, як і для точки Γ , складається з одного вектора $\mathbf{k}_A = -(1/2)\mathbf{b}_1$ [1]. Фактор-група групи хвильового вектора за інваріантною підгрупою трансляцій для кристалів графіту також, як і для точки Γ , ізоморфна групі $6/mmm(D_{6h})$.

Як показано в [1], двозначні (спірні) незвідні проективні представлення в точці A зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ відносяться до проективного класу K_4 співпадаючої з групою кристалічного класу точкової групи симетрії еквівалентних напрямків $F_k 6/mmm(D_{6h})$, оскільки однозначні (векторні) проективні представлення для точки A, що визначаються властивостями просторової групи симетрії кристала графіту $P6_3/mmc(D_{6h})$ в точці A, відносяться до проективного класу K_5 [1], перетворення спірних при операціях симетрії груп напрямків груп хвильових векторів – до проективного класу K_1 , а добуток проективних класів K_5 і K_1 , який визначається шляхом попарного перемноження значень коефіцієнтів α , β і $\gamma(\alpha_{(5)}\alpha_{(1)}, \beta_{(5)}\beta_{(1)})$ і $\gamma_{(5)}\gamma_{(1)}$ в системі позначень проективних класів [1], дорівнює $K_5K_1 = K_4$.

Фактор-система з урахуванням спіну для точки A $\omega_{2,A}(r_2, r_1)$ є добутком фактор-систем $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$, що визначається структурою просторової групи кристала графіту $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ в точці A без урахування спіну, і $\omega_2(r_2, r_1)$, яка опи-

Таблиця 2. Характери представлень еквівалентності, D_{eq} , представлень, що характеризують просторову симетрію π -орбіталей, D_z , спінових представлень $D_{1/2}^+$, спінових представлень $D'_z = D_z \times D_{1/2}^+$, які характеризують симетрію π -орбіталей з урахуванням спіну (спінових π -орбіталей), та характери представлень, що для різних точок зон Бріллюена структур кристалічного графіту $\gamma - C$ і одношарового графіну $C_{L,1}$ характеризують симетрію електронних π -зон з урахуванням спіну – D'_π

Точки Γ
Точкові групи $6/mmm(D_{6h})$
Проективні класи K_1 за винятком представлень Γ_{eq} і Γ_z

$6/mmm(D_{6h})$			e	c_3	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u'_2$	i	ic_3	ic_3^2	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
$\gamma - C$	$\mathbf{k} = 0$	Γ_{eq}	4	4	4	0	0	0	0	4	0	0	0	4	4	4	4	0
		Γ_z	1	1	1	-1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	-1	-1	-1	1
		$D_{1/2}^+$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		Γ'_z	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		Γ'_π	8	4	-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$4\sqrt{3}$	$-4\sqrt{3}$	0
$C_{L,1}$	$\mathbf{k} = 0$	Γ_{eq}	2	2	2	0	0	0	0	2	0	0	0	2	2	2	2	0
		Γ'_π	4	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	$2\sqrt{3}$	$-2\sqrt{3}$	0

Точка A
Точкова група $6/mmm(D_{6h})$
Проективний клас K_4 за винятком представлень A_{eq} і A'_z

$6/mmm(D_{6h})$			e	c_3	c_3^2	$3u_2$	c_2	c_6^5	c_6	$3u'_2$	i	ic_3	ic_3^2	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
$\gamma - C$	$\mathbf{k}_A =$ $-(1/2)\mathbf{b}_1$	A_{eq}	4	4	4	0	0	0	0	0	0	0	0	4	0	0	0	0
		A'_z	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0	-2	-1	1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		A'_π	8	4	-4	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

Точки K
Точкові групи $\bar{6}m2(D_{3h})$
Проективні класи K_1 за винятком представлень K_{eq} , K_z і K_π

$\bar{6}m2(D_{3h})$			e	c_3	c_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
$\gamma - C$	$(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	K_{eq}	4	1	1	0	4	1	1	0
		K_z	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
		K_π	4	1	1	0	-4	-1	-1	0
		$D_{1/2}^+$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		K'_z	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		K'_π	8	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
$C_{L,1}$	$(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$	K_{eq}	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0
		K_π	2	-1	-1	0	-2	1	1	0
		K'_π	4	-1	1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0

Точка H
Точкова група $\bar{6}m2(D_{3h})$
Проективні класи K_1 (H_{eq} , H_π , $D_{1/2}^+$ і H'_z) та $K_0(H'_z)$

$\bar{6}m2(D_{3h})$			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
		H_z	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
		H_π	4	1	1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
		$D_{1/2}^+$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		H'_z	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
		H'_π	8	1	-1	0	0	$3i$	$3i$	0

Точка P
Точкова група $3m(C_{3v})$
Проективний клас K_0

$3m(C_{3v})$		e	c_3	c_3^2	$3iu'_2$	
$\gamma - C$	$(\mathbf{k}_P)_1 = -\mathbf{k}_z - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	P_{eq}	4	1	1	0
	$(\mathbf{k}_P)_2 = -\mathbf{k}_z + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	P_z	1	1	1	1
	$(\mathbf{k}_P)_3 = \mathbf{k}_z - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	P_π	4	1	1	0
	$(\mathbf{k}_P)_4 = \mathbf{k}_z + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$	$D_{1/2}^+$	2	1	-1	0
		P'_z	2	1	-1	0
		P'_π	8	1	-1	0

Точки M
Точкові групи $mmm(D_{2h})$
Проективні класи K_0 (M_{eq}, M_z і M_π) та K_1 ($D_{1/2}^+, M'_z$ і M'_π)

$mmm(D_{2h})$			e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
$\gamma - C$	$(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_3,$ $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_2$ $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3),$	M_{eq}	4	0	0	4	0	4	4	0
		M_z	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
		M_π	4	0	0	-4	0	4	-4	0
		$D_{1/2}^+$	2	0	0	0	2	0	0	0
		M'_z	2	0	0	0	-2	0	0	0
		M'_π	8	0	0	0	0	0	0	0
$C_{L,1}$	$(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_2$ $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_1$ $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$	M_{eq}	2	0	0	2	0	2	2	0
		M_π	2	0	0	-2	0	2	-2	0
		M'_π	4	0	0	0	0	0	0	0

Точка L
Точкова група $mmm(D_{2h})$
Проективні класи K_5 (L_π) та K_4 (L'_π)

$mmm(D_{2h})$			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
		L_z	1	-1	1	-1	-1	1	-1	1
		L_π	4	0	0	0	0	4	0	0
		$D_{1/2}^+$	2	0	0	0	2	0	0	0
		L'_z	2	0	0	0	-2	0	0	0
		L'_π	8	0	0	0	0	0	0	0

сує перетворення спінорів в точці Γ (в точковій групі симетрії $6/mmm(D_{6h})$), тобто $\omega_{2,A}(r_2, r_1) = \omega_{1,A}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1)$. Фактор-системи $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ і $\omega_2(r_2, r_1)$ наведені в [1] (табл. 6 і табл. 1, відповідно), де детально описано їх побудову. Фактор-систему $\omega_{2,A}(r_2, r_1)$ наводимо в табл. 4.

Стандартна фактор-система з урахуванням спіну для точки A $\omega'_{2,A}(r_2, r_1)$, що належить проективному класу K_4 , співпадає із стандартною фактор-системою цього класу $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ і є добутком стандартних фактор-систем $\omega'_{1,A}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$ і $\omega'_2(r_2, r_1)$, тобто $\omega'_{2,A}(r_2, r_1) \equiv$

$\omega'_{(4)}(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)\omega'_2(r_2, r_1)$. Ця фактор-система представлена в табл. 5. Коефіцієнти зведення фактор-системи $\omega_{2,A}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{2,A}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ – коефіцієнти $u_{2,A}(r)$ визначаються добутками відповідних коефіцієнтів зведення до стандартного вигляду фактор-систем $\omega_{1,A}(r_2, r_1)$ і $\omega_2(r_2, r_1)$ – коефіцієнтів $u_{1,A}(r)$ і $u_2(r)$, тобто $u_{2,A}(r) = u_{1,A}(r)u_2(r)$ [1]. Значення коефіцієнтів $u_{2,A}(r)$ наведені в нижній частині табл. 4.

Характери незвідних проективних представлень проективного класу K_4 , що відповідають стандар-

Таблиця 3. Розподіли електронних збуджень для електронних π -зон у точках високої симетрії зон Бріллюена за незвідними проективними представленнями відповідних проективних класів для структур кристалічного графіту $\gamma - C$ і одношарового графену $C_{L,1}$ без урахування спіну електрона (а) і з його урахуванням (б)

Кристал графіту, $\gamma - C$	Одношаровий графен, $C_{L,1}$
Точки Γ Точкові групи $6/mmm(D_{6h})$	
а) Проективні класи K_0	
$\Gamma_{\pi} = 2(\Gamma_2^{(0)+}) + 2(\Gamma_3^{(0)-})$ ($\Gamma_{\pi} = 2\Gamma_2^{+} + 2\Gamma_3^{-}$)	$\Gamma_{\pi} = (\Gamma_2^{(0)+}) + (\Gamma_3^{(0)-})$ ($\Gamma_{\pi} = \Gamma_2^{+} + \Gamma_3^{-}$)
б) Проективні класи K_1	
$\Gamma'_{\pi} = 2((\Gamma'_1)^{(1)+}) + 2((\Gamma'_2)^{(1)-})$ ($\Gamma'_{\pi} = 2\Gamma_7^{+} + 2\Gamma_8^{-}$)	$\Gamma'_{\pi} = ((\Gamma'_1)^{(1)+}) + ((\Gamma'_2)^{(1)-})$ ($\Gamma'_{\pi} = \Gamma_7^{+} + \Gamma_8^{-}$)
Точки A Точкова група $6/mmm(D_{6h})$	
а) Проективний клас K_5	
$A_{\pi} = 2A_1^{(5)}[(A_1^{(5)})_1 + (A_1^{(5)})_2]$	
б) Проективний клас K_4	
$A'_{\pi} = 2(A'_3)^{(4)}[(A'_3)^{(4)}_1 + ((A'_3)^{(4)})_2]$	
Точки K Точкові групи $\bar{6}m2(D_{3h})$	
Проективні класи K_0	
$K_{\pi} = K_2^{(0)} + K_4^{(0)} + K_6^{(0)}$	$K_{\pi} = K_6^{(0)}$
Проективні класи K_1	
$K'_{\pi} = 2(K'_1)^{(1)} + (K'_2)^{(1)} + (K'_3)^{(1)}$	$K'_{\pi} = (K'_2)^{(1)} + (K'_3)^{(1)}$
Точки H Точкова група $\bar{6}m2(D_{3h})$	
а) Проективний клас K_1	
$H_{\pi} = H_1^{(1)} + H_3^{(1)}$	
б) Проективний клас K_0	
$H'_{\pi} = ((H'_1)^{(0)} + (H'_3)^{(0)}) + (H'_5)^{(0)} + 2(H'_6)^{(0)}$	
Точки P Точкова група $3m(C_{3v})$	
а) Проективний клас K_0	
$P_{\pi} = P_1^{(0)} + P_2^{(0)} + P_3^{(0)}$	
б) Проективний клас K_0	
$P'_{\pi} = ((P'_1)^{(0)} + (P'_2)^{(0)}) + 3(P'_3)^{(0)}$	
Точки M Точкові групи $mmm(D_{2h})$	
а) Проективні класи K_0	
$M_{\pi} = 2(M_2^{(0)+}) + 2(M_3^{(0)-})$	$M_{\pi} = (M_2^{(0)+}) + (M_3^{(0)-})$
б) Проективні класи K_1	
$M'_{\pi} = 2((M')^{(1)+}) + 2((M')^{(1)-})$	$M'_{\pi} = ((M')^{(1)+}) + ((M')^{(1)-})$
Точка L Точкова група $mmm(D_{2h})$	
а) Проективний клас K_5	
$L_{\pi} = 2L_1^{(5)}$	
б) Проективний клас K_4	
$L'_{\pi} = 2((L')^{(4)}_1) + (L')^{(4)}_2$	

Таблиця 4. Фактор-система $\omega_{2,A}(r_2, r_1)$ для точки A зони Бріллюена кристалу графіту γ - C (просторова група симетрії $R6_3 / msc (D_6^4)$), проєктивний клас K_4). У нижній частині таблиці приведені значення функцій $u_{2,A}(r)$, що приводять фактор-систему $\omega_{2,A}(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_{2,A}(r_2, r_1) \equiv \omega'_0(r_2, r_1)$

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

Таблиця 5. Стандартна фактор-система для точки А зони Бриллюена кристалу графіту з урахуванням спіну електрону $\omega'_{2,A}(r_2, r_1)$ (просторова група $R_6 / msc (D_{6h}^4)$, проективний клас K_4), що збігається зі стандартною фактор-системою проективного класу K_4 точкової групи симетрії $6 / mmm (D_{6h})$ $\omega'_{2,A}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(4)}(r_2, r_1)$

$\omega'_{2,A}(r_2, r_1) = \omega'_{(4)}(r_2, r_1)$		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		
r_1	r_2	e	c_3	c_5^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
a	1	e	c_3	c_5^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
	2	c_3	c_5^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$			
	3	c_5^2	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	
	4	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6		
	5	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$
	6	$(u_2)_3$	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
b	7	c_2	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
	8	c_6^5	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$			
	9	c_6	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	
	10	$(u_2)_1$	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6		
	11	$(u_2)_2$	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$
	12	$(u_2)_3$	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
c	13	i	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
	14	ic_3	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$			
	15	ic_5^2	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	
	16	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6		
	17	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$
	18	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	
d	19	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$		
	20	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$			
	21	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	
	22	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6		
	23	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$
	24	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$i(u_2)_1$	$i(u_2)_2$	$i(u_2)_3$	

Таблиця 6. Характери незвідних проективних представлень проективного класу K_4 , що відповідають стандартній фактор-системі цього класу $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$

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	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
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
	$u_{2,A}(r)$	1	-1	1	i	i	$-i$	$-i$	-1	1	-1	1	i	$-i$	i	i	1

Таблиця 7. Характери двоозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точки A зони Бріллоена кристалічного графіту $\gamma - C$

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	$3iu_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu'_2$
K_4	$((A')_1^{(4)} + (A')_2^{(4)}) \left\langle \begin{matrix} (A')_1^{(4)} \\ (A')_2^{(4)} \\ (A')_3^{(4)} \end{matrix} \right.$	2	-2	2	$2i$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		2	-2	2	$-2i$	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0
		4	2	-2	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0	0

тній фактор-системі цього класу $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$, наведені в табл. 6, а двоозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точки A – в табл. 7. В нижній частині табл. 6 приведені значення коефіцієнтів $u_{2,A}(r)$ і, як і повинно бути, виконуються рівності

$$(A')_i^{(4)} = u_{2,A}(r)P_i^{(4)}. \quad (6)$$

Характери проективного представлення еквівалентності в точці A – представлення A_{eq} , двоозначних представлень $A'_z \equiv \Gamma'_z$ і A'_π наведені в табл. 2, а розподіли електронних збуджень в точці A зони Бріллоена кристалічного графіту $\gamma - C$ для π -зон без урахування і з урахуванням спіну електрона представлені в табл. 3.

Цікавим є те, що електронні збудження π -зон в точці A зони Бріллоена кристалічного графіту $\gamma - C$ з урахуванням спіну чотирикратно вироджені, оскільки їх стани перетворюються за чотиривимірними незвідними проективними представленнями проективного класу K_4 .

За відсутності зовнішніх магнітних полів на хвильові функції станів і, відповідно, на представлен-

ня накладаються додаткові умови, пов'язані з інваріантністю до інверсії часу. При виконанні цих умов для деяких станів може виникати додаткове виродження.

Врахування інваріантності станів до інверсії часу для точок Γ і A зон Бріллоена кристалічного графіту і точки Γ для одношарового графену проведемо за допомогою критерію Херрінга [5, 6, 9], процедура розрахунку якого детально описана у [10, 9]. Підрахунок суми при розрахунку цього критерію ведеться за елементами $g' = (\alpha | r')$ групи хвильового вектора G_k , що відповідають умові $g'k = -k$ ($r'k = -k$).

Для точок Γ і A кристалічного графіту $\gamma - C$ і точки Γ для одношарового графену $C_{L,1}$ зірки хвильових векторів мають по одному променю. В цих точках хвильові вектори $-k$ і k еквівалентні ($-k \equiv k$) і умові $g'k = -k$ для кристалічного графіту $\gamma - C$ задовольняють елементи: $g'_1 = (0 | e)$, $g'_2 = (0 | c_3)$, $g'_3 = (0 | c_3^2)$, $g'_4 = (0 | (u_2)_1)$, $g'_5 = (0 | (u_2)_2)$, $g'_6 = (0 | (u_2)_3)$, $g'_7 = (\frac{\alpha_1}{2} | c_2)$, $g'_8 = (\frac{\alpha_1}{2} | c_6^5)$, $g'_9 = (\frac{\alpha_1}{2} | c_6)$, $g'_{10} = (\frac{\alpha_1}{2} | (u'_2)_1)$, $g'_{11} = (\frac{\alpha_1}{2} | (u'_2)_2)$, $g'_{12} = (\frac{\alpha_1}{2} | (u'_2)_3)$, $g'_{13} = (0 | i)$, $g'_{14} = (0 | i c_3)$, $g'_{15} = (0 | i c_3^2)$, $g'_{16} = (0 | i (u_2)_1)$,

$g'_{17} = (0|i(u_2)_2)$, $g'_{18} = (0|i(u_2)_3)$, $g'_{19} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_2)$, $g'_{20} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_6^5)$, $g'_{21} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_6)$, $g'_{22} = (\frac{\alpha_1}{2}|i(u'_2)_1)$, $g'_{23} = (\frac{\alpha_1}{2}|i(u'_2)_2)$, і $g'_{24} = (\frac{\alpha_1}{2}|i(u'_2)_3)$, а для одношарового графену $C_{L,1}$ – ці самі значення, в яких нетривіальна трансляція $\frac{\alpha_1}{2} = 0$, оскільки просторова група одношарового графену є симорфною і, на відміну від просторової групи кристалічного графіту, не містить нетривіальних трансляцій.

Легко обчислити квадрати цих елементів $(g')^2 = (r\alpha + \alpha|r^2)$: для точок Γ і A кристалічного графіту – $(g'_1)^2 = (0|e)$, $(g'_2)^2 = (0|c_3^2)$, $(g'_3)^2 = (0|qc_3)$, $(g'_4)^2 = (0|q)$, $(g'_5)^2 = (0|q)$, $(g'_6)^2 = (0|q)$, $(g'_7)^2 = (\mathbf{a}_1|q)$, $(g'_8)^2 = (\mathbf{a}_1|qc_3^2)$, $(g'_9)^2 = (\mathbf{a}_1|c_3)$, $(g'_{10})^2 = (0|q)$, $(g'_{11})^2 = (0|q)$, $(g'_{12})^2 = (0|q)$, $(g'_{13})^2 = (0|e)$, $(g'_{14})^2 = (0|c_3^2)$, $(g'_{15})^2 = (0|qc_3)$, $(g'_{16})^2 = (0|q)$, $(g'_{17})^2 = (0|q)$, $(g'_{18})^2 = (0|q)$, $(g'_{19})^2 = (0|q)$, $(g'_{20})^2 = (0|qc_3^2)$, $(g'_{21})^2 = (0|c_3)$, $(g'_{22})^2 = (\mathbf{a}_1|q)$, $(g'_{23})^2 = (\mathbf{a}_1|q)$ і $(g'_{24})^2 = (\mathbf{a}_1|q)$, де q – поворот навколо відповідної осі на кут 2π , а для точки Γ одношарового графену $C_{L,1}$ – ці самі значення, для яких вектор тривіальної трансляції $\mathbf{a}_1 = 0$.

Із значень критерію Херрінга, етапи і результати розрахунків якого наведені в табл. 18 (Додаток), неважко бачити, що всі як однозначні, так і двозначні проєктивні представлення в точках Γ і A для кристалічного графіту і точки Γ для одношарового графену, за винятком представлень $(A')_1^{(4)}$ і $(A')_2^{(4)}$ для кристалічного графіту відносяться до випадку a_1 [9], коли додаткове виродження станів при врахуванні їх інваріантності до інверсії часу відсутнє. В той же час проєктивні представлення в точці A для кристалічного графіту – представлення $(A')_1^{(4)}$ і $(A')_2^{(4)}$ відносяться до випадку b_1 [9] і, як представлення з комплексно спряженими характеристиками, об'єднуються, збільшуючи кратність виродження електронних станів до чотирьох. Саме це об'єднання комплексно спряжених представлень і вказане в табл. 7.

3.1.3. Точка Δ

Групою еквівалентних напрямків групи хвильового вектора в точці Δ для кристалічного графіту $\gamma - C$ є група $6mm(C_{6v})$. Зірка хвильового вектора в цій точці містить два промені. Незвідні однозначні і двозначні проєктивні представлення для точки Δ приведені в [1]. Умові $g'\mathbf{k} = -\mathbf{k}$ в цій точці задовольняють елементи: $g'_4 = (0|(u_2)_1)$,

$g'_5 = (0|(u_2)_2)$, $g'_6 = (0|(u_2)_3)$, $g'_{10} = (\frac{\alpha_1}{2}|(u'_2)_1)$, $g'_{11} = (\frac{\alpha_1}{2}|(u'_2)_2)$, $g'_{12} = (\frac{\alpha_1}{2}|(u'_2)_3)$, $g'_{13} = (0|i)$, $g'_{14} = (0|ic_3)$, $g'_{15} = (0|ic_3^2)$, $g'_{19} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_2)$, $g'_{20} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_6^5)$ і $g'_{21} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_6)$, а квадрати цих елементів, як легко розрахувати, дорівнюють: $(g'_4)^2 = (0|q)$, $(g'_5)^2 = (0|q)$, $(g'_6)^2 = (0|q)$, $(g'_{10})^2 = (0|q)$, $(g'_{11})^2 = (0|q)$, $(g'_{12})^2 = (0|q)$, $(g'_{13})^2 = (0|e)$, $(g'_{14})^2 = (0|c_3^2)$, $(g'_{15})^2 = (0|qc_3)$, $(g'_{19})^2 = (0|q)$, $(g'_{20})^2 = (0|qc_3^2)$ і $(g'_{21})^2 = (0|c_3)$.

Неважко бачити, обчисливши критерії Херрінга, що всі, як однозначні, так і двозначні незвідні проєктивні представлення в цій точці відносяться до випадку a_2 [9] (індекс 2 означає, що \mathbf{k} нееквівалентно $-\mathbf{k}$, але просторова група містить елемент R , який переводить \mathbf{k} в $-\mathbf{k}$), коли додаткове виродження станів при врахуванні їх інваріантності до інверсії часу відсутнє. Умови сумісності незвідних проєктивних представлень вздовж напрямку $\Gamma-\Delta-A$, який є напрямком найвищої симетрії в зоні Бріллоена кристалічної структури з просторовою групою симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, нами наведено на рис. 5 в [1].

3.2. Лінія $K-P-H$ кристалічного графіту і точка K одношарового графену

3.2.1. Перепозначення

Перш за все зробимо важливе уточнення.

Значення матриць незвідних представлень груп хвильового вектора $D_{\mathbf{k}}(h)$ і їх характеристик $\chi_{D_{\mathbf{k}}(h)}$ містять не врахований нами в побудові характеристик незвідних представлень в роботі [1] фазовий множник $e^{-i\mathbf{k}(\alpha+\mathbf{a})}$ (формули (6) і (7) роботи [1]), де \mathbf{k} – хвильовий вектор, α – вектор нетривіальної трансляції і \mathbf{a} – вектор тривіальної трансляції для елемента просторової групи симетрії $g = (\alpha + \mathbf{a}|r)$. Для головних елементів просторової групи можна вибрати $\mathbf{a} = 0$ і тоді цей фазовий множник набере вигляду $e^{-i\mathbf{k}\alpha}$, де вектор нетривіальної трансляції α відповідає “поворотному” елементу r , тобто головному елементу просторової групи симетрії $h = (\alpha|r)$. Врахування фазового множника $e^{-i\mathbf{k}\alpha}$ для елементів r є необхідним для побудови коректного незвідного проєктивного представлення групи хвильового вектора у випадках, коли скалярний добуток $(\mathbf{k}, \alpha) \neq 0$. Зауважимо, що для розглянутої вище точки A для характеристик представлень “поворотних” елементів r , що не дорів-

новали нулю, вектор нетривіальної трансляції α завжди дорівнював нулю.

Оскільки фазовий множник $e^{-i\mathbf{k}\alpha}(r)$ є властивістю просторової симетрії періодичної структури, його можна ввести в означення представлення еквівалентності атомів, замінивши формулу [15] роботи [1] на формулу

$$\chi_{\text{eq}}(R_\alpha) = e^{-i\mathbf{k}\alpha}(R_\alpha) \sum_j \delta_{R_\alpha r_j, r_j} e^{i\mathbf{K}_m r_j}, \quad (7)$$

а застосоване раніше значення $\chi_{\text{eq}}(R_\alpha)$ без фазового множника вважати як $(\chi_{\text{eq}})_0(R_\alpha)$, тобто нове значення D_{eq} буде містити фазовий множник $e^{-i\mathbf{k}\alpha}(R_\alpha)$, а значення D_{eq} для різних точок зони Бріллюена в роботі [1], як таке, що не містить фазовий множник, позначити, як $(D_{\text{eq}})_0$.

В точках K і H для кристалічного графіту $\gamma-C$ і в точці K одношарового графену $C_{L,1}$ фактор-групи груп хвильових векторів за інваріантними підгрупами трансляцій ізоморфні одній і тій самій точковій групі симетрії $\bar{m}2(D_{3h})$.

Зірки груп хвильового вектора в точках K і для кристалічного графіту $\gamma-C$ і для одношарового графену $C_{L,1}$ містять по два вектори: для кристалічного графіту $(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ і $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$, а для одношарового графену $(\mathbf{k}_K)_1 = -(1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ і $(\mathbf{k}_K)_2 = (1/3)(2\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$. Для кристалічного графіту вектор нетривіальної трансляції $\alpha = \mathbf{a}_1/2$ перпендикулярний до хвильових векторів $(\mathbf{k}_K)_1$ і $(\mathbf{k}_K)_2$ і тому значення фазового множника $e^{-i\mathbf{k}_K \alpha}$ в усіх випадках дорівнює одиниці, як і для одношарового графену, де вектор нетривіальної трансляції дорівнює нулю. Це означає, що для обох структур фактор-системи $\omega_{1,K}(r_2, r_1)$ складаються тільки із значень "+1", тобто вони є повністю одиничними фактор-системами, які співпадають із стандартними фактор-системами проективного класу K_0 , а фактор-системи для проективних представлень в точках K з урахуванням спіну $\omega_{2,K}(r_2, r_1)$, оскільки $\omega_{2,K}(r_2, r_1) = \omega_{1,K}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1) = \omega'_{(0)}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1) = \omega_2(r_2, r_1)$, співпадають з фактор-системою $\omega_2(r_2, r_1)$, що належить проективному класу K_1 .

Характери незвідних проективних представлень проективних класів K_0 (де вони співпадають із звичайними або векторними представленнями) і K_1 групи $\bar{m}2(D_{3h})$, які відповідають стандартним фактор-системам $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ (одиничній фактор-

системі, яка містить тільки коефіцієнти із значеннями "+1") і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$, відповідно, наведені в табл. 8. Характери двовимірних незвідних проективних представлень, що відповідають стандартній фактор-системі $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ в табл. 8, позначені символом P . В нижній частині табл. 8 приведені значення коефіцієнтів $u_{2,K}(r) \equiv u_2(r)$.

В табл. 9 представлені характери співпадаючих для структур кристалічного графіту і одношарового графену двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точок K зон Бріллюена цих структур.

Слід відмітити, що для двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точок K зон Бріллюена кристалічного графіту і графену виконуються рівності

$$(K')_i^{(1)} = u_2(r)P_i^{(1)}. \quad (8)$$

Крім рівностей (8), для різних точок зон Бріллюена, наприклад, для точок K , можна визначити також, як розкладаються характери представлень прямих добутків $K_i \otimes D_{1/2}^+$, де K_i – характер i -го проективного незвідного представлення без урахування спіну електрона, за двозначними (спінорними) проективними незвідними представленнями

Таблиця 8. Характери незвідних проективних представлень проективних класів K_0 і K_1 групи $\bar{m}2(D_{3h})$, які відповідають стандартним фактор-системам $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ (одинична фактор-система для звичайних векторних представлень) і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$, відповідно

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення		$\bar{m}2(D_{3h})$							
			e	e_3	e_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$
K_0	$K_1^{(0)}$	K_1	1	1	1	1	1	1	1	1
	$K_2^{(0)}$	K_2	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
	$K_3^{(0)}$	K_3	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	$K_4^{(0)}$	K_4	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	$K_5^{(0)}$	K_5	2	-1	-1	0	2	-1	-1	0
	$K_6^{(0)}$	K_6	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
	$P_2^{(1)}$		2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
	$P_2^{(1)}$		2	2	2	0	0	0	0	0
	$u_{2,K}(r) \equiv u_2(r)$		1	-1	1	i	i	$-i$	$-i$	-1

з урахуванням спіну, тобто, яким орбіталям без урахування спіну при його врахуванні відповідатимуть які орбіталі, або яка сума орбіталей, з урахуванням спіну.

Знаючи розподіли представлення електронних π -зон в точках K кристалічного графіту і одношарового графену без урахування спіну електрона (табл. 12 в роботі [1]), визначимо цю відповідність. Так, для добутків $K_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$, $K_4^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і $K_6^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$, характери яких представлені в нижній частині табл. 9, легко встановити умови сумісності незвідних проективних представлень, що виникають при врахуванні спіну електрона для орбіталей K_i без його врахування, а саме: орбіталі $K_2^{(0)}$ при врахуванні спіну електрона відповідає орбіталь з його врахуванням $(K')_1^{(1)}$, орбіталі $K_4^{(0)}$ – також орбіталь $(K')_1^{(1)}$, а орбіталі $K_6^{(0)}$ – сума орбіталей $(K')_2^{(1)} + (K')_3^{(1)}$, тобто при врахуванні спіну електрона двократно вироджена орбіталь $K_6^{(0)}$ без його врахування розщеплюється на дві двократно вироджені спінові орбіталі $(K')_2^{(1)}$ і $(K')_3^{(1)}$.

Характери проективних представлень для точок K : представлень еквівалентності K_{eq} , представлень просторової симетрії π -орбіталей K_z , представлень симетрії електронних π -зон без врахування спіну електрона K_π , двозначних представлень $D_{1/2}^+$, K'_z і представлень симетрії електронних π' -

Таблиця 9. Характери двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень групи $\bar{6}m2(D_{3h})$ (проективний клас K_1), спінорного представлення $D_{1/2}^+(r)$ і добутків проективних представлень $K_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$, $K_4^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і $K_6^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$\bar{6}m2(D_{3h})$							
		e	c_3	c_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$
K_1	$(K')_1^{(1)}$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$(K')_2^{(1)}$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
	$(K')_3^{(1)}$	2	-2	2	0	0	0	0	0
	$D_{1/2}^+(r)$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
K_1	$K_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$K_4^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	2	1	-1	0	0	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$	0
	$K_6^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	4	-1	1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0

зон з врахуванням спіну електрона K'_π наведені в табл. 2, а розподіли електронних збуджень в точках K зон Бріллюена кристалічного графіту $\gamma-C$ і одношарового графену $C_{L,1}$ для π -зон без урахування і з урахуванням спіну електрона за двозначними (спінорними) незвідними проективними представленнями точок K надані в табл. 3.

Важливим наслідком урахування спіну електрона для електронних збуджень в точках K є передбачене теоретико-груповим аналізом розщеплення в результаті врахування спін-орбітальної взаємодії двократно вироджених безспінових орбіталей $K_6^{(0)}$ як в структурі кристалічного графіту, так і в структурі одношарового графену. Але це розщеплення для вуглецевих структур є надзвичайно малим ($\sim 1,0-1,5$ меВ [2]) і на кривих дисперсії, де енергії станів вимірюються одиницями та десятками електрон-вольт, не буде помітним. З точки зору теоретико-групового опису це розщеплення безспінових орбіталей $K_6^{(0)}$ при врахуванні спіну на спінові орбіталі $(K')_2^{(1)}$ і $(K')_3^{(1)}$ є принциповим і для неуглецевих структур з просторовою групою симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, наприклад, для диалкогенідів перехідних металів воно може бути значним.

3.2.2. Точка H

Як вже згадувалось вище, фактор-група хвильового вектора за нескінченною інваріантною підгрупою трансляцій в точці H зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ 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 [1] показано, що як фактор-система просторової групи симетрії кристалічного графіту в точці H його зони Бріллюена $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$ з коефіцієнтами зведення до стандартного вигляду $u_{1,H}(r)$, так і фактор-система перетворень спінової змінної $\omega_2(r_2, r_1)$ з коефіцієнтами зведення до стандартного вигляду $u_2(r)$, належать одному й тому проективному класу K_1 . Це означає, що двозначні (спінорні) незвідні проективні представлення для точки H зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ будуть належати проективному класу K_0 ($K_1 \cdot K_1 = K_0$), а коефіцієнти зведення фактор-системи перетворень з урахуванням спіну електрона $\omega_{2,H}(r_2, r_1) = \omega_{1,H}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1)$ до стандарт-

Таблиця 10. Характери однозначних незвідних проективних представлень проективного класу K_1 групи $\bar{6}m2(D_{3h})$, відповідаючі його стандартній фактор-системі (а), і однозначних p -еквівалентних їм представлень, які описують симетрію коливальних і електронних збуджень без врахування спіну в точці H зони Бріллюена кристалічного графіту для просторової групи симетрії (групи хвильового вектора точки H), що є підгрупою просторової групи симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$ (б)

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$\bar{6}m2(D_{3h})$								
		e	c_3	c_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$	
K_1	a	$P_1^{(1)}$	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
		$u_{1,H}(r)$	1	1	1	1	i	i	i	i
		$e^{i\mathbf{k}_H\alpha}(r)$	1	1	1	1	i	i	i	i
		$e^{i\mathbf{k}_H\alpha}(r)u_{1,H}(r)$	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1
K_1	b	$H_1^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$-\sqrt{3}i$	$\sqrt{3}i$	0
		$H_2^{(1)}$	2	-1	-1	0	0	$\sqrt{3}i$	$-\sqrt{3}i$	0
		$H_3^{(1)}$	2	2	2	0	0	0	0	0

ного вигляду в цій точці будуть визначатися рівністю $u_{2,H}(r) = u_{1,H}(r)u_2(r)$. Для побудови характеристик двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точки H необхідно врахувати ще фазовий множник $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)$, тобто, визначити результуючі множники $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)u_{1,H}(r)u_2(r)$, на які треба домножити характери незвідних проективних представлень проективного класу K_0 (ними є характери векторних представлень для точкової групи симетрії $\bar{6}m2(D_{3h})$).

Характери однозначних незвідних проективних представлень проективного класу K_1 точкової групи $\bar{6}m2(D_{3h})$, які відповідають стандартній фактор-системі цього класу, і характери однозначних незвідних проективних представлень, що характеризують просторову симетрію коливальних і без врахування спіну електронних збуджень в точці H зони Бріллюена кристалічного графіту наведені в табл. 10, а і табл. 10, б¹,

відповідно. У нижній частині табл. 10, а наведені значення коефіцієнтів $u_{1,H}(r)$, що приводять відповідну просторовій симетрії точки H фактор-систему проективного класу K_1 до стандартного вигляду, значення фазових множників $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)$ і добуток коефіцієнтів $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)u_{1,H}(r)$. Характери двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень, які відносяться до проективного класу K_0 і характеризують симетрію електронних збуджень з врахуванням спіну електрона, наведені у табл. 11, а. У нижній частині табл. 11, а наведені значення коефіцієнтів $u_{1,H}(r)$ і $u_2(r)$, що приводять до стандартного вигляду фактор-систему $\omega_{1,H}(r_2, r_1)$ і $\omega_2(r_2, r_1)$, відповідно, значення фазових множників $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)$, добуток коефіцієнтів $e^{-i\mathbf{k}_H\alpha}(r)u_{1,H}(r)u_2(r)$ і характеристик двозначного спірного представлення $D_{1/2}^+(r)$ точкової групи симетрії $\bar{6}m2(D_{3h})$. У табл. 11, б представлені характери добуток проективних представлень $H_1^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$ і $H_3^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$, за допомогою яких неважко встановити умови сумісності незвідних проективних представлень для безспінових орбіталей точки H – орбіталей $H_i^{(1)}$ проективного класу K_1 , з незвідними проективними представленнями спінових орбіталей $(H')_i^{(0)}$ проективного класу K_0 , що виникають при врахуванні спіну електрона. Так, безспіновій орбіталі $H_1^{(1)}$ при врахуванні спіну електрона відповідає сума спінових орбіталей

¹ Цікаво відмітити, що характери наданих нами в табл. 10, б даної роботи однозначних незвідних проективних представлень для точки H зони Бріллюена кристалічного графіту (просторова група симетрії кристалічного графіту $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, фактор-група групи хвильового вектора для точки H за інваріантною підгрупою трансляцій ізоморфна точковій групі $\bar{6}m2(D_{3h})$), які відносяться до проективного класу K_1 , точно співпадають з характеристиками перших трьох незвідних представлень в [8] (табл. С.28, стор. 519).

Таблиця 11. Характери двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точки H зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ (просторова група симетрії $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$, проективний клас K_0) (а) і добутоків проективних представлень $H_1^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$ і $H_3^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$ (б)

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$\bar{6}m2(D_{3h})$								
		e	c_3	c_3^2	$3u_2$	ic_2	ic_6^5	ic_6	$3iu_2'$	
K_0	а	$(H'_1)^{(0)}$	1	-1	1	i	$-i$	i	i	1
		$(H'_2)^{(0)}$	1	-1	1	i	i	$-i$	$-i$	-1
		$(H'_3)^{(0)}$	1	-1	1	$-i$	$-i$	i	i	-1
		$(H'_4)^{(0)}$	1	-1	1	$-i$	i	$-i$	$-i$	1
		$(H'_5)^{(0)}$	2	1	-1	0	$-2i$	$-i$	$-i$	0
		$(H'_6)^{(0)}$	2	1	-1	0	$2i$	i	i	0
		$u_{1,H}(r)$	1	1	1	1	i	i	i	i
		$u_2(r)$	1	-1	1	i	i	$-i$	$-i$	-1
		$e^{i\mathbf{k}_H \mathbf{a}}(r)$	1	1	1	1	i	i	i	i
		$e^{i\mathbf{k}_H \mathbf{a}}(r)u_{1,H}(r)u_2(r)$	1	-1	1	i	$-i$	i	i	1
K_0	б	$D_{1/2}^+(r)$	2	1	-1	0	0	$-\sqrt{3}$	$\sqrt{3}$	0
		$H_1^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$	4	-1	1	0	0	$3i$	$3i$	0
		$H_3^{(1)} \otimes D_{1/2}^+$	4	2	-2	0	0	0	0	0
		H'_π	8	1	-1	0	0	$3i$	$3i$	0

$((H'_1)^{(0)} + (H'_3)^{(0)}) + (H'_6)^{(0)}$, а безспіновій орбіталі $H_3^{(1)}$ – сума спінових орбіталей $(H'_5)^{(0)} + (H'_6)^{(0)}$. Значення характерів проективного представлення всіх електронних π -зон з врахуванням електронного спіну (π' -зон) для точки H зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ – представлення H'_π , що дорівнюють сумі відповідних значень характерів всіх спінових орбіталей $(H'_i)^{(0)}$, наведені у нижній частині табл. 11, б. Ці самі значення характерів проективного представлення H'_π неважко одержати і за формулою (4) (для точки H – за формулою $H'_\pi = H_{\text{eq}} \otimes H'_z$, де H'_z – представлення, що характеризує симетрію π -електрона з врахуванням спіну в точці H зони Бріллюена кристалічного графіту).

В табл. 2 наведені характери представлення еквівалентності для точки H зони Бріллюена кристалічного графіту – представлення H_{eq} , представлень $H_z \equiv \Gamma_z$ і $H_\pi = H_{\text{eq}} \otimes H_z$, що описують просторову симетрію π -електрона і електронних π -зон без урахування спіну, відповідно, двозначного (спінорного) представлення $D_{1/2}^+$ і двозначних представлень $H'_z = H_z \otimes D_{1/2}^+$ та $H'_\pi = H_{\text{eq}} \otimes H'_z$, які описують симетрії π -електрона і електронних

π -зон з урахуванням спіну, а в табл. 3 наведено розподіл електронних π' -зон з урахуванням спіну в точці H за двозначними (спінорними) незвідними проективними представленнями проективного класу K_0 .

Проведений нами розрахунок критерію Херрінга для точки H за елементами симетрії, які задовольняють рівності $g'\mathbf{k} = -\mathbf{k}$, тобто, за елементами $g'_7 = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | c_2)$, $g'_8 = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | c_6^5)$, $g'_9 = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | c_6)$, $g'_{10} = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | (u'_2)_1)$, $g'_{11} = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | (u'_2)_2)$, $g'_{12} = (\frac{\mathbf{a}_1}{2} | (u'_2)_3)$, $g'_{13} = (0 | i)$, $g'_{14} = (0 | ic_3)$, $g'_{15} = (0 | ic_3^2)$, $g'_{16} = (0 | i(u_2)_1)$, $g'_{17} = (0 | i(u_2)_2)$ і $g'_{18} = (0 | i(u_2)_3)$, квадрати яких дорівнюють $(g'_7)^2 = (\mathbf{a}_1 | q)$, $(g'_8)^2 = (\mathbf{a}_1 | qc_3^2)$, $(g'_9)^2 = (\mathbf{a}_1 | c_3)$, $(g'_{10})^2 = (0 | q)$, $(g'_{11})^2 = (0 | q)$, $(g'_{12})^2 = (0 | q)$, $(g'_{13})^2 = (0 | e)$, $(g'_{14})^2 = (0 | c_3^2)$, $(g'_{15})^2 = (0 | qc_3)$, $(g'_{16})^2 = (0 | q)$, $(g'_{17})^2 = (0 | q)$ і $(g'_{18})^2 = (0 | q)$, свідчить про те, що двозначні одновимірні спінові незвідні проективні представлення в точці H зони Бріллюена кристалічного графіту $(H'_1)^{(0)}$ і $(H'_3)^{(0)}$ відносяться до випадку b_2 [9] і завдяки інваріантності до інверсії часу повинні об'єднуватись, хоча наш випадок відповідає об'єднанню не комплексно спряжених, а нееквівалентних комплексних представлень, в той

же час, як двозначні двовимірні комплексно спряжені незвідні проєктивні представлення $(H')_5^{(0)}$ і $(H')_6^{(0)}$ відносяться до випадку a_2 [9] і при врахуванні симетрії до інверсії часу не об'єднуються.

3.2.3. Точка P

Групою еквівалентних напрямків групи хвильового вектора в точці P зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ є група $3m (C_{3v})$. Група $3m (C_{3v})$ має лише один клас проєктивних представлень – це клас K_0 і тому всі проєктивні представлення групи $3m (C_{3v})$ p-еквівалентні векторним. Зірка хвильового вектора в цій точці містить чотири промені: $(\mathbf{k}_P)_1 = -\mathbf{k}_z - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$, $(\mathbf{k}_P)_2 = -\mathbf{k}_z + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$, $(\mathbf{k}_P)_3 = \mathbf{k}_z - (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$ і $(\mathbf{k}_P)_4 = \mathbf{k}_z + (1/3)(2\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$.

У табл. 12 наведені однозначні незвідні проєктивні представлення проєктивного класу K_0 групи $3m (C_{3v})$ точки P зони Бріллюена кристалічного графіту (a), двозначні (спінорні) незвідні проєктивні представлення також проєктивного класу K_0 цієї групи еквівалентних напрямків, характери спірного представлення $D_{1/2}^+$, добутки проєктивних представлень $P_1^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$, $P_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і $P_3^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і характери проєктивного представлення електронних π' -зон з врахуванням спіну електрона – P'_π (б). У нижній частині табл. 12, a наведені значення коефіцієнтів $u_2(r)$, що приводять фактор-систему перетворень спінової змінної $\omega_2(r_2, r_1)$ до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(0)}(r_2, r_1)$, а у нижній частині всієї табл. 12 вказано значення фазового множника.

Характери однозначних проєктивних представлень еквівалентності P_{eq} , однозначних проєктивних представлень P_z і P_π та двозначних проєктивних представлень $D_{1/2}^+$, P'_z і двозначного (спінорного) проєктивного представлення електронних π' -зон з врахуванням спіну електрона – представлення P'_π для точки P зони Бріллюена кристалічного графіту наведені в табл. 2, а розподіли проєктивних представлень електронних π -зон без урахування спіну електрона P_π і з його урахуванням P'_π за незвідними однозначними та двозначними проєктивними представленнями, відповідно, приведені в табл. 3.

Розрахунок критерію Херрінга для точки P зони Бріллюена кристалічного графіту за елемента-

ми симетрії, що задовольняють вимозі $g'\mathbf{k} = -\mathbf{k}$, а саме, за елементами $g'_{10} = (\frac{a_1}{2} |(u'_2)_1)$, $g'_{11} = (\frac{a_1}{2} |(u'_2)_2)$, $g'_{12} = (\frac{a_1}{2} |(u'_2)_3)$, $g'_{13} = (0 | i)$, $g'_{14} = (0 | ic_3)$ і $g'_{15} = (0 | ic_3^2)$, квадрати яких дорівнюють $(g'_{10})^2 = (0 | q)$, $(g'_{11})^2 = (0 | q)$, $(g'_{12})^2 = (0 | q)$, $(g'_{13})^2 = (0 | e)$, $(g'_{14})^2 = (0 | c_3^2)$ і $(g'_{15})^2 = (0 | qc_3)$, показує, що двозначні одновимірні спінорні незвідні проєктивні представлення в цій точці $(P')_1^{(0)}$ і $(P')_2^{(0)}$ відносяться до випадку b_2 [9] і завдяки інва-

Таблиця 12. Характери однозначних незвідних проєктивних представлень проєктивного класу K_0 групи $3m(C_{3v})$, які описують симетрію коливальних і електронних збуджень без врахування спіну для просторової групи симетрії в точці P (групи хвильового вектора точки P) зони Бріллюена кристалічного графіту і є p-еквівалентними характеристиками однозначних незвідних проєктивних представлень відповідно до стандартної одиничної фактор-системи цього проєктивного класу, (a), характери двозначних (спінорних) незвідних проєктивних представлень точки P зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ (просторова група симетрії $P6_3/mmc(D_{6h}^4)$, проєктивний клас K_0), характери двозначного спірного незвідного проєктивного представлення $D_{1/2}^+$, характери добутків проєктивних представлень $P_1^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$, $P_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і $P_3^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$ і характери двозначного проєктивного представлення електронних π' -зон з урахуванням спіну електрона – представлення $P'_\pi(\delta)$

Проєктивний клас	Позначення незвідного проєктивного представлення	$3m(C_{3v})$				
		e	c_3	c_3^2	$3iu'_2$	
K_0	a	$P_1^{(0)}$	1	1	1	η_{k_z}
		$P_2^{(0)}$	1	1	1	$-\eta_{k_z}$
		$P_3^{(0)}$	2	-1	-1	0
		$u_2(r)$	1	-1	1	i
K_0	b	$(P')_1^{(0)}$	1	-1	1	$i\eta_{k_z}$
		$(P')_2^{(0)}$	1	-1	1	$-i\eta_{k_z}$
		$(P')_3^{(0)}$	2	1	-1	0
		$D_{1/2}^+$	2	1	-1	0
		$P_1^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	2	1	-1	0
		$P_2^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	2	1	-1	0
		$P_3^{(0)} \otimes D_{1/2}^+$	4	-1	1	0
	P'_π	8	1	-1	0	

* $\eta_{k_z} = e^{-ik_P a_1/2} = e^{-ik_z a_1/2}$

ріантності до інверсії часу об'єднуються у двовимірне проєктивне представлення $((P')_1^{(0)} + (P')_2^{(0)})$, а однозначні незвідні проєктивні представлення $P_1^{(0)}$, $P_2^{(0)}$, $P_3^{(0)}$ і двозначне (спінорене) проєктивне представлення $(P')_3^{(0)}$ відносяться до випадку a_2 [9] і при врахуванні симетрії до інверсії часу не об'єднуються.

В граничній для точок P точці H зони Бріллюена кристалічного графіту при абсолютному неврахуванні спіну електрона, коли фазовий множник $e^{-ik_z a_1/2}$ при $k_z = -b_1/2$ приймає значення i , суми характеристик одновимірних однозначних незвідних проєктивних представлень $P_1^{(0)}$ і $P_2^{(0)}$, як представлень комплексно спряжених, повинні були б переходити в характери двовимірного однозначного незвідного проєктивного представлення $H_3^{(1)}$, яке відноситься до проєктивного класу K_1 більш високої групи симетрії, ніж група симетрії точок P . Неважко також бачити з табл. 12, б, що безспіновим орбіталям $P_1^{(0)}$ і $P_2^{(0)}$ при врахуванні спіну електрона відповідають спінові орбітали $(P')_3^{(0)}$, а безспіновій орбіталі $P_3^{(0)}$ – сума об'єднаних спінових орбіталей $((P')_1^{(0)} + (P')_2^{(0)})$ і спінової орбіталі $(P')_3^{(0)}$.

3.3. Лінія $M-U-L$ кристалічного графіту і точка M одношарового графену

В точках M і L для зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma-C$ і в точці M зони Бріллюена одношарового графену $C_{L,1}$ фактор-групи груп хвильових векторів за інваріантними підгрупами трансляцій ізоморфні одній і тій самій точковій групі симетрії $mmm(D_{2h})$, яка для точок M цих структур є точковою групою симетрії еквівалентних напрямків.

3.3.1. Точки M

Зірки груп хвильових векторів в точках M зон Бріллюена для обох структур містять по три промені: для кристалічного графіту $\gamma-C$ $(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_3$, $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_2$ і $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$, а для одношарового графену $C_{L,1}$: $(\mathbf{k}_M)_1 = -(1/2)\mathbf{b}_2$, $(\mathbf{k}_M)_2 = (1/2)\mathbf{b}_1$ і $(\mathbf{k}_M)_3 = -(1/2) \times (\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$.

Як це було зроблено в [1] для точкової групи $6/mmm(D_{6h})$, перш за все для точкової групи $mmm(D_{2h})$ побудуємо фактор-систему $\omega_2(r_2, r_1)$, що описує перетворення співорів під дією опера-

цій симетрії та знайдемо коефіцієнти $u_2(r)$, які зводять її до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1)$.

З трьох променів зірок хвильового вектора точки M для зон Бріллюена як кристалічного графіту, так і одношарового графену розглянемо промені $(\mathbf{k}_M)_1$ (точки M_1), для яких елементами симетрії, що переводять ці промені в еквівалентні, утворюючи точкову групу симетрії $mmm(D_{2h})$, є елементи e , $(u_2)_1$, c_2 , $(u'_2)_1$, i , $i(u_2)_1$, ic_2 та $i(u'_2)_1$. У ролі твірних елементів цієї групи $mmm(D_{2h})$ виберемо елементи $a = (u_2)_1$, $b = c_2$ і $c = i$. При такому виборі твірних елементів враховується принцип композиції, відповідно до якого група mmm може бути представлена як прямий добуток груп $222 \otimes \bar{1}$ ($mmm = 222 \otimes \bar{1}$ або $D_{2h} = D_2 \otimes C_i$), а група 222 як прямий добуток груп $2' \otimes 2$ ($222 = 2' \otimes 2$ або $D_2 = C'_2 \otimes C_2$).

Скориставшись визначаючими співвідношеннями, обчислимо всі значення $\omega_2(r_2, r_1)$. Зрозуміло, що за визначаючі співвідношення при цьому повинні бути взяті визначаючі співвідношення для подвійної групи $(mmm)'$:

$$a^4 = e, \quad b^4 = e, \quad c^2 = e,$$

$$ab = qba, \quad ac = ca, \quad bc = cb.$$

Розрахована в такий спосіб за методикою [1] для групи mmm фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ наведена в табл. 13, а. Ця фактор-система відноситься до проєктивного класу K_1 , оскільки для неї $\alpha = -1$, $\beta = 1$ і $\gamma = 1$ [1]. Нижніми індексами біля значень коефіцієнтів фактор-системи $\omega_2(r_2, r_1)$ в табл. 13, а, що містять цифри в круглих дужках, представлено таблицю множення елементів групи mmm (числами в дужках вказані цифрові позначення елементів, які відповідають добуткам $r_2 r_1$).

Фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ за допомогою коефіцієнтів $u_2(r)$, що наведені в нижній частині табл. 13, а, зводиться до p -еквівалентного блоково-симетричного вигляду, який відповідає означенню стандартної фактор-системи [1], тобто, фактор-системи $\omega'_2(r_2, r_1)$. При цьому значення коефіцієнтів $u_2(r)$ можуть бути розраховані за формулами (13.3), (14.18) і (14.19) [9] або при побудові розширеної групи – групи представлень [9], де вони визначаються за її однозначними незвідними представленнями, які є додатковими до звичайних векторних представлень.

Таблиця 13. Фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ для групи $mmm (D_{2h})$ (а) та стандартна фактор-система $\omega'_2(r_2, r_1)$, що відповідає її стандартному вигляду (б). У нижній частині табл. 13, 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							
r_2	r_1	1	2	3	4	5	6	7	8
		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₎
$u_2(r)$		1	i	i	-1	1	i	i	-1

а

$\omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$		r_1									
r_2	r_1	1	2	3	4	5	6	7	8		
		e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$		
а	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₎
б	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₎
с	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

Таблиця 14. Характери незвідних представлень подвійної групи $(mmm)' (D'_{2h})$

$(mmm)' (D'_{2h})$		e	q	$(u_2)_1,$ $q(u_2)_1$	$c_2,$ qc_2	$(u'_2)_1,$ $q(u'_2)_1$	i	qi	$i(u_2)_1,$ $qi(u_2)_1$	$ic_2,$ qic_2	$i(u'_2)_1,$ $qi(u'_2)_1$
K_0	Γ_1^+	A_1^+	1	1	1	1	1	1	1	1	1
	Γ_1^-	A_1^-	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
	Γ_2^+	A_2^+	1	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1
	Γ_2^-	A_2^-	1	1	1	-1	-1	-1	-1	1	1
	Γ_3^+	B_1^+	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	-1
	Γ_3^-	B_1^-	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	1
	Γ_4^+	B_2^+	1	1	-1	-1	1	1	-1	-1	1
	Γ_4^-	B_2^-	1	1	-1	-1	1	-1	1	1	-1
K_1	$((\Gamma')^{(1)})^+$	Γ_5^+	$(E')^+$	2	-2	0	0	2	-2	0	0
	$((\Gamma')^{(1)})^-$	Γ_5^-	$(E')^-$	2	-2	0	0	-2	2	0	0

Значення коефіцієнтів $u_2(r)$, що характеризують перетворення спінових функцій, для однакових елементів r , які входять до різних точкових груп, зокрема, в нашому випадку, в точкові групи mmm і $6/mmm$, де група mmm до того ж є підгрупою групи $6/mmm$, виявились, як і слід було очікувати, однаковими. Це означає, що представлена в табл. 13, б фактор-система дійсно є стандартною фактор-системою проєктивного класу K_1 точкової групи mmm , тобто фактор-системою $\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$. В табл. 13, б суцільними лініями виділені контури блоків для коефіцієнтів, що мають значення “-1”.

У табл. 14 наведені характери незвідних представлень подвійної групи $(mmm)' (D'_{2h})$, додаткові однозначні незвідні представлення якої (додаткові до звичайних векторних однозначних незвідних представлень групи mmm , що можуть бути одер-

жані з представлень групи $(mmm)'$ простим викреслюванням із всіх співвідношень елемента q) і є двозначними проєктивними або спінорними представленнями групи mmm . Спінорні представлення позначаються символами $(E')^+$ і $(E')^-$ в системі позначень Малікена або символами Γ_5^+ і Γ_5^- в системі позначень Костера, де великою буквою Γ позначена не тільки їх приналежність до певної точкової групи (в даному випадку групи mmm), а і до співпадаючої з нею групи еквівалентних напрямків групи хвильового вектора точки Γ в кристалах або періодичних наноструктурах, символами K_0 і K_1 позначені відповідні проєктивні класи, а позначення $((\Gamma')^{(1)})^+$ і $((\Gamma')^{(1)})^-$ запропоновані нами (в цих позначеннях штрих означає, що представлення двозначне спінорне, верхній індекс (цифра в дужках) вказує проєктивний клас, а значками “+” і “-” позначено парність представлення).

Характери незвідних представлень точкової групи $mmm (D_{2h})$ проективних класів K_0 (звичайних однозначних або векторних) і K_1 (двозначних проективних або спірорних) для стандартних фактор-систем $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ точкової групи mmm представлені в табл. 15, а співпадаючі з ними характери незвідних проективних представлень для точок M зон Бріллюена кристалічного графіту і одношарового графену наведені в табл. 16. В групі $mmm (D_{2h})$ вісь другого порядку $(u_2)_1$, як старша вісь в структурно виділе-

Таблиця 15. Характери однозначних (векторних) та двозначних (спірорних) незвідних проективних представлень групи $mmm (D_{2h})$, відповідаючі стандартним фактор-системам $\omega'_{(0)}(r_2, r_1)$ (проективний клас K_0) і $\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ (проективний клас K_1), відповідно

$mmm (D_{2h})$	e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
K_0	A_1^+	1	1	1	1	1	1	1
	A_1^-	1	1	1	1	-1	-1	-1
	A_2^+	1	1	-1	-1	1	1	-1
	A_2^-	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	B_1^+	1	-1	1	-1	1	-1	1
	B_1^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1
	B_2^+	1	-1	-1	1	1	-1	1
	B_2^-	1	-1	-1	1	-1	1	-1
K_1	$(P^{(1)})^+$	2	0	0	0	2	0	0
	$(P^{(1)})^-$	2	0	0	0	-2	0	0

Таблиця 16. Характери однозначних (векторних) (проективний клас K_0) та двозначних (спірорних) (проективний клас K_1) незвідних проективних представлень точок M зон Бріллюена кристалічного графіту та одношарового графену

$mmm (D_{2h})$	e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$
K_0	M_1^+	1	1	1	1	1	1	1
	M_1^-	1	1	1	1	-1	-1	-1
	M_2^+	1	1	-1	-1	1	1	-1
	M_2^-	1	1	-1	-1	-1	-1	1
	M_3^+	1	-1	1	-1	1	-1	1
	M_3^-	1	-1	1	-1	-1	1	-1
	M_4^+	1	-1	-1	1	1	-1	1
	M_4^-	1	-1	-1	1	-1	1	-1
K_1	$((M')^{(1)})^+$	2	0	0	0	2	0	0
	$((M')^{(1)})^-$	2	0	0	0	-2	0	0

ній старшій підгрупі [вісь c_2 задіяно у розширенні групи з елементів e і $(u_2)_1$ (групи C'_2) до групи D_2], тобто у формуванні прямого добутку груп $C'_2 [(U_2)_1]$ та C_2 вісь $(u_2)_1$ відіграє роль головної осі, за якою визначаються символи (номери) незвідних представлень. Легко бачити, що характери незвідних проективних представлень класу K_1 групи mmm для стандартної фактор-системи класу K_1 групи mmm , де вони позначені символами $(P^{(1)})^+$ і $(P^{(1)})^-$, та характери незвідних проективних представлень класу K_1 групи mmm для точок M , які позначені символами M_5^+ і M_5^- (чи $((M')^{(1)})^+$ і $((M')^{(1)})^-$), збігаються з характеристиками спірорних незвідних представлень подвійної групи $(mmm)'$.

Характери проективного представлення еквівалентності в точці M – представлення M_{eq} , представлення $M_z \equiv \Gamma_z$, що визначає просторову симетрію p_z орбіталі, представлення електронних π -зон без врахування спіну M_π , двозначних представлень $D_{1/2}^+$, $M'_z \equiv \Gamma'_z$ і M'_π наведені в табл. 2, а розподіли електронних збуджень в точках M зон Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ і одношарового графену $C_{L,1}$ для π -зон без врахування і з врахуванням спіну електрона за однозначними і, відповідно, за двозначними (спірорними) незвідними проективними представленнями точок M надані в табл. 3.

3.3.2. Точка L

Фактор-група групи хвильового вектора за інваріантною підгрупою трансляцій в точках L зони Бріллюена кристалічного графіту, як вже згадувалось вище, також ізоморфна точковій групі $mmm (D_{2h})$. Зірка хвильового вектора точки L для структури графіту $\gamma - C$ також містить три промені: $(\mathbf{k}_L)_1 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_3)$, $(\mathbf{k}_L)_2 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 - \mathbf{b}_2)$ і $(\mathbf{k}_L)_3 = -(1/2)(\mathbf{b}_1 + \mathbf{b}_2 - \mathbf{b}_3)$.

З трьох променів зірки хвильового вектора точки L для зони Бріллюена кристалічного графіту, як і раніше для точки M , розглянемо промінь $(\mathbf{k}_L)_1$, для якого елементами симетрії, що переводять промені зірки хвильового вектора точки L в еквівалентні, утворюючи точкову групу симетрії $mmm (D_{2h})$, є елементи e , $(u_2)_1$, c_2 , $(u'_2)_1$, i , $i(u_2)_1$, ic_2 та $i(u'_2)_1$. У ролі твірних елементів цієї групи mmm , як і для групи точки M , виберемо елементи $a = (u_2)_1$, $b = c_2$ і $c = i$.

Таблиця 17. Характери незвідних проективних представлень проективного класу K_4 групи $mmm(D_{2h})$, які відповідають стандартній фактор-системі цього класу $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ (а) та характери двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень точки L зони Бріллюена кристалічного графіту $\gamma - C$ (б)

Проективний клас	Позначення незвідного проективного представлення	$mmm(D_{2h})$								
		e	$(u_2)_1$	c_2	$(u'_2)_1$	i	$i(u_2)_1$	ic_2	$i(u'_2)_1$	
K_4	a	$P_1^{(4)}$	2	2	0	0	0	0	0	0
		$P_2^{(4)}$	2	-2	0	0	0	0	0	0
		$u_{1,L}(r)$	1	1	1	1	1	1	-1	-1
		$u_2(r)$	1	i	i	-1	1	i	i	-1
		$e^{-ik_L\alpha}(r)$	1	1	i	i	1	1	i	i
		$e^{ik_L\alpha}(r)u_{1,L}(r)u_2(r)$	1	i	-1	- i	1	i	1	i
		$D_{1/2}^+$	2	0	0	0	2	0	0	0
K_4	b	$(L'_1)^{(4)} + (L'_2)^{(4)} < L_1^{(4)}$	2	$2i$	0	0	0	0	0	0
		$L_2^{(4)}$	2	$-2i$	0	0	0	0	0	0
		L'_π	8	0	0	0	0	0	0	0

Як було показано в [1], фактор-система $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ належить проективному класу K_5 групи $mmm(D_{2h})$ і зводиться до стандартного вигляду $\omega'_{1,L}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(5)}(r_2, r_1)$ за допомогою коефіцієнтів $u_{1,L}(r)$, що наведені в [1] у нижній частині табл. 17, а, а фактор-система $\omega_2(r_2, r_1)$ перетворення спінорів при операціях симетрії групи $mmm(D_{2h})$, як і для точки M , належить проективному класу K_1 і зводиться до стандартного вигляду $\omega'_2(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ за допомогою коефіцієнтів $u_2(r)$, які наведені в даній роботі у нижній частині табл. 13, а. Це означає, що фактор-система з урахуванням спіну для точки L $\omega_{2,L}(r_2, r_1)$ є добутком фактор-системи $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ (проективний клас K_5), що визначається структурою просторової групи кристалічного графіту в точці L без врахування спіну, і $\omega_2(r_2, r_1)$ (проективний клас K_1), яка описує перетворення спінорів в точці L (в точковій групі симетрії $mmm(D_{2h})$), тобто $\omega_{2,L}(r_2, r_1) = \omega_{1,L}(r_2, r_1)\omega_2(r_2, r_1)$.

Стандартна фактор-система з урахуванням спіну для точки L $\omega'_{2,L}(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)\omega'_2(r_2, r_1) = \omega'_{(5)}(r_2, r_1)\omega'_{(1)}(r_2, r_1)$ відноситься до проективного класу K_4 групи $mmm(D_{2h})$ (оскільки $K_5 \cdot K_1 = K_4$) і співпадає із стандартною фактор-системою проективного класу K_4 групи

$mmm(D_{2h})$, тобто $\omega'_{2,L}(r_2, r_1) \equiv \omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ з коефіцієнтами зведення до стандартного вигляду $u_{2,L}(r)$, які визначаються добутком відповідних коефіцієнтів зведення до стандартного вигляду фактор-систем $\omega_{1,L}(r_2, r_1)$ і $\omega_2(r_2, r_1)$ – коефіцієнтів $u_{1,L}(r)$ і $u_2(r)$, тобто $u_{2,L}(r) \equiv u_{1,L}(r)u_2(r)$.

Характери незвідних проективних представлень точкової групи $mmm(D_{2h})$ проективного класу K_4 для стандартної фактор-системи $\omega'_{(4)}(r_2, r_1)$ точкової групи mmm представлені в табл. 17, а. В нижній частині табл. 17, а наведені значення коефіцієнтів $u_{1,L}(r)$, $u_2(r)$, фазових множників $e^{-ik_L\alpha}(r)$, добутків коефіцієнтів $e^{-ik_L\alpha}(r)u_{1,L}(r)u_2(r) \equiv e^{-ik_L\alpha}(r)u_{2,L}(r)$ та характери незвідного спінорного проективного представлення $D_{1/2}^+$. Характери двозначних (спінорних) незвідних проективних представлень для точки L зони Бріллюена кристалічного графіту, обчислені за формулою

$$(L')_i^{(4)} = e^{-ik_L\alpha}(r)u_{1,L}(r)u_2(r)P_i^{(4)} = e^{-ik_L\alpha}(r)u_{2,L}(r)P_i^{(4)}, \quad (9)$$

представлені в табл. 17, б. У нижній частині табл. 17, б представлені характери двозначного спінорного проективного представлення електронних π' -зон з врахуванням спіну електрона.

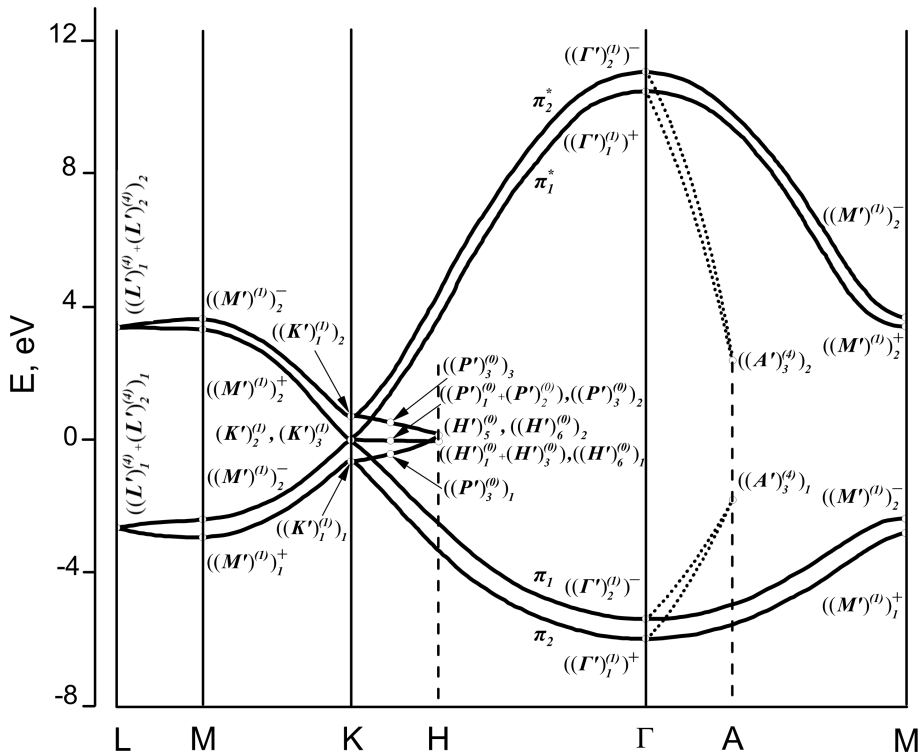


Рис. 4. Дисперсія енергетичних електронних π' -зон з врахуванням спіну електрона

Характери проективного представлення еквівалентності в точці L – представлення L_{eq} , представлення $L_z \equiv \Gamma_z$, що визначає просторову симетрію p_z -орбіталі, представлення електронних π -зон без врахування спіну L_π , двозначних представлень $D_{1/2}^+$, $L'_z \equiv \Gamma'_z$ і L'_π наведені в табл. 2, а розподіли електронних збуджень в точці L зони Бріллюена кристалічного графіту для π -зон без врахування спіну електрона і з його врахуванням за однозначними і за двозначними (спінорними) незвідними проективними представленнями точки L , відповідно, надані в табл. 3.

Проведений нами розрахунок критерію Херрінга за елементами симетрії точки L зони Бріллюена кристалічного графіту, для яких виконується рівність $g'k = -k$, тобто за елементами $g'_1 = (0|e)$, $g'_4 = (0|(u_2)_1)$, $g'_7 = (\frac{\alpha_1}{2}|c_2)$, $g'_{10} = (\frac{\alpha_1}{2}|(u'_2)_1)$, $g'_{13} = (0|i)$, $g'_{16} = (0|i(u_2)_1)$, $g'_{19} = (\frac{\alpha_1}{2}|ic_2)$ і $g'_{22} = (\frac{\alpha_1}{2}|i(u'_2)_1)$, квадрати яких дорівнюють $(g'_1)^2 = (0|e)$, $(g'_4)^2 = (0|q)$, $(g'_7)^2 = (\alpha_1|q)$, $(g'_{10})^2 = (0|q)$, $(g'_{13})^2 = (0|e)$, $(g'_{16})^2 = (0|q)$, $(g'_{19})^2 = (0|q)$ і $(g'_{22})^2 = (\alpha_1|q)$, свідчить

про те, що двозначні (спінорні) незвідні проективні представлення точки L зони Бріллюена кристалічного графіту, які належать проективному класу K_4 – представлення $(L'_1)^{(4)}$ та $(L'_2)^{(4)}$ – відносяться до випадку b_1 [9] і, як представлення з комплексно спряженими характеристиками, при врахуванні інваріантності до інверсії часу об'єднуються в чотиривимірні $((L'_1)^{(4)} + (L'_2)^{(4)})_1$ та $((L'_1)^{(4)} + (L'_2)^{(4)})_2$, збільшуючи кратність виродження електронних станів для кожного з них до чотирьох. Саме це об'єднання представлень з комплексно спряженими характеристиками і вказане в табл. 17, б.

На рис. 4 схематично зображено дисперсію енергетичних електронних π -зон з урахуванням спіну (π' -зон) кристалів графіту (буквами позначені точки зони Бріллюена, а буквами з індексами – двозначні спінорні незвідні проективні представлення вказаних верхніми індексами в круглих дужках відповідних проективних класів). Схематичне зображення дисперсії електронних π' -зон на рис. 4 представлено для всіх точок високої симетрії в зоні Бріллюена кристалічного графіту. Воно добре

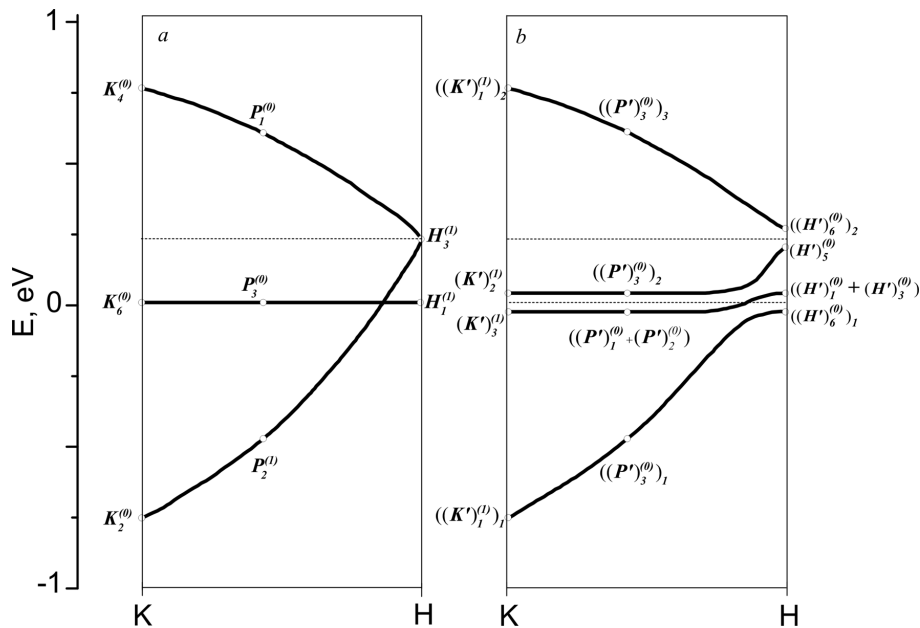


Рис. 5. Дисперсії енергетичних електронних π -зон в напрямку K – P – H зони Бріллюена кристалів графіту γ – C без врахування спіну електрона (а) і π' -зон з врахуванням спіну електрона (б). Тонка спин-залежна структура π' -зон на рис. 5, б зображена схематично із збільшенням енергії розщеплень електронних π' -зон приблизно в 10^3 разів

якісно узгоджується з чисельними розрахунками без врахування спіну електрона, тобто, при малій величині спин-орбітальної взаємодії в роботах [11, 12], але додатково включає також якісну поведінку дисперсії електронних π' -зон вздовж лінії Γ – Δ – A .

На рис. 5, а зображено дисперсію електронних π' -зон вздовж лінії K – P – H зони Бріллюена кристалічного графіту без врахування спіну електрона, а на рис. 5, б якісно представлено дуже збільшену за шкалою енергій (в, приблизно, 10^3 разів) для наведених на рис. 5, б розщеплень електронних станів тонку спин-залежну структуру енергетичних π' -зон, яку передбачає послідовне застосування методів симетрійного теоретико-групового аналізу для визначення дисперсії електронних π -зон кристалічного графіту при врахуванні електронного спіну. Величина спин-залежних розщеплень може бути значною, наприклад, для дихалькогенідів перехідних металів такої самої просторової групи симетрії, але є невеликою для кристалічного графіту і одношарового графену, оскільки вона зумовлена малою енергією спин-орбітальної взаємодії для атомів вуглецю і, як наслідок, для вуглецевих структур.

4. Висновки

По роботі можна зробити такі висновки:

1. Вперше для кристалічного графіту (просторова група симетрії $P6_3/mmc (D_{6h}^4)$) та одношарового графену (диперіодична просторова група $P6/mmm (DG80)$) надано симетрійний теоретико-груповий опис дисперсії електронних π -зон та визначені умови сумісності незвідних проективних представлень з урахуванням спіну електрона та змін проективних класів для різних точок високої симетрії їхніх зон Бріллюена.

2. Представлено кореляцію електронних збуджень кристалічного графіту з урахуванням спіну електрона зі спинорними збудженнями одношарового графену.

3. Вперше за допомогою симетрійних теоретико-групових методів вказано на існування тонкої структури електронних π -зон, що виникає при врахуванні спіну електрона навіть при незначній величині спин-орбітальної взаємодії. Такими тонкими структурами є виникнення незначної ($\sim 1,0$ – $1,5$ меВ за оцінками [2]) забороненої зони між валентною зоною і зоною провідності в точках Дірака та їх дуже малому околі і в кристалічному гра-

Таблиця 18 (Доплаток). Розрахунок критерію Херрінга. Етапи та результати обчислення характеристик $\chi_{k, D_\mu}[(g')^2]$ і відповідні їм значення критерію Херрінга для незвідних представлень в точках Г і А

$(g')^2$, $I =$	$e^{-1/k}(v+n)$		$u(r^2) \equiv u_r(r^2)$	$\chi_{k, D_\mu}[(g')^2]$				$Q^{(S)}$	$\chi_{k, D_\mu}[(g')^2]$				$v(r^2)$	$\chi_{D_\mu}[(g')^2]$				$\chi_{k, D_\mu}[(g')^2]$									
	Γ	A		$(A_1^+)^{(0)}$, $(A_2^+)^{(0)}$, $(A_3^+)^{(0)}$, $(A_4^+)^{(0)}$	$(E_1^+)^{(0)}$, $(E_2^+)^{(0)}$	$(E_1^-)^{(0)}$, $(E_2^-)^{(0)}$	$(P_1^+)^{(0)}$, $(P_2^+)^{(0)}$		$(P_1^-)^{(0)}$, $(P_2^-)^{(0)}$	Γ_1^+ , Γ_2^+ , Γ_3^+ , Γ_4^+	Γ_1^- , Γ_2^- , Γ_3^- , Γ_4^-	A_1 , A_2		A_3	$u_2(r^2)$	$(P_1^+)^{(1)}$, $(P_2^+)^{(1)}$, $(P_3^+)^{(1)}$, $(P_2^-)^{(1)}$	$Q^{(4)}$	Γ_7^+ , Γ_7^- , Γ_8^+ , Γ_8^-	Γ_9^+ , Γ_9^-	A_4 , A_5 , A_6							
1	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	1	1	1	2	2	4	2	2	4	2	2	4	2	2	4
2	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	1	-1	1	1	2	2	2	-2
3	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	1	-1	1	1	2	2	2	-2
4	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
5	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
6	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
7	1	-1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
8	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	-2
9	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	-2
10	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
11	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
12	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
13	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
14	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
15	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	-2
16	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
17	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
18	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
19	1	1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	-4
20	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
21	1	1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	-2	2	1	-1	1	1	-1	-1	-2	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
22	1	-1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
23	1	-1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
24	1	-1	1	1	2	2	4	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	4	1	-1	1	1	2	2	2	2	4
$\sum_{(g')^2} \chi_k[(g')^2] \delta_{k, -g'/k}$															1	1	1	1	1	1	-1	-1	0	-1			

фіті, і в одношаровому графені, та нова інтерпретація невеликих розщеплень (спін-залежної тонкої структури) електронних π' -зон з врахуванням спіну електрона в точці H кристалічного графіту на основі встановленої зміни проєктивних класів незвідних проєктивних представлень груп хвильового вектора, яка виключає існування перетину кривих дисперсії електронних зон поблизу точки H .

ДОДАТОК:

Розрахунок критерію Херрінга

Розрахунок критерію Херрінга, а також етапи та результати обчислення характеристик $\chi_{\mathbf{k}, D_\mu} [(g')^2]$, $\chi_{\mathbf{k}, D'_\mu} [(g')^2]$ і відповідні їм значення критерію Херрінга для незвідних представлень в точках Γ і A наведено в табл. 18.

1. В.О. Губанов, А.П. Науменко, М.М. Білий, І.С. Доценко, О.М. Навозенко, М.М. Сабов, Л.А. Булавін. Кореляція енергетичних спектрів коливальних і електронних збуджень та їхня дисперсія в графіті та графені. *УФЖ* **63** (5), 431 (2018).
2. M.I. Katsnelson. *Graphene: Carbon in Two Dimensions* (Cambridge Univ. Press, 2012).
3. J.D. Bernal. The structure of graphite. *Proc. Roy. Soc. London A* **106** (740), 749 (1924).
4. T. Hahn. *International Tables for Crystallography. Vol. A. Space Group Symmetry* (D. Reidel, 1983).
5. C. Herring. Effect on time-reversal symmetry on energy bands of crystals. *Rhys. Rev.* **52** (4), 361 (1937).
6. C. Herring. Accidental degeneracy in the energy bands of crystals. *Rhys. Rev.* **52** (4), 365 (1937).
7. E.A. Wood. The 80 di-periodic groups in three dimensions. *Bell System Techn. J.* **43** (1), 541 (1964).
8. M.S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, A. Jorio. *Group Theory. Application to the Physics of Condensed Matter* (Springer, 2008).
9. Г.Л. Вир, Г.Е. Пикус. *Симметрия и деформационные эффекты в полупроводниках* (Наука, Гл. ред. физ.-мат. лит., 1972).
10. Д.С. Бальчук, М.М. Білий, В.П. Гришук, В.О. Губанов, В.К. Кононов. Симетрія коливальних мод, інварі-

антність енергетичних станів до інверсії часу і комбінаційне розсіяння світла в кристалах 4H- та 6H-SiC. 1. Класифікація енергетичних станів у зонах Бриллюена. *УФЖ* **41** (2), 146 (1996).

11. E. Doni, G. Pastori Parravicini. Energy Bands and Optical Properties of Hexagonal Boron Nitride and Graphite. *Nuovo Cimento B* **64** (1), 117 (1969).
12. Ф. Бассани, Дж. Пастори Парравичини. *Електронные состояния и оптические переходы в твердых телах* (Наука, 1982).

Одержано 22.08.19

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

ENERGY SPECTRA OF ELECTRON EXCITATIONS IN GRAPHITE AND GRAPHENE AND THEIR DISPERSION MAKING ALLOWANCE FOR THE ELECTRON SPIN AND THE TIME-REVERSAL SYMMETRY

S u m m a r y

The dispersion dependences of electron excitations in crystalline graphite and single-layer graphene have been studied taking the electron spin into consideration. The correlations of the energy spectra of electron excitations and, for the first time, the compatibility conditions for two-valued irreducible projective representations characterizing the symmetry of spinor excitations in the indicated structures are determined, as well as the distributions of spinor quantum states over the projective classes and irreducible projective representations for all high-symmetry points in the corresponding Brillouin zones. With the help of theoretical symmetry-group methods for the spatial symmetry groups of crystalline graphite and single-layer graphene (in particular, the splitting of π -bands at the Dirac points), the spin-dependent splittings in their electron energy spectra are found. The splitting magnitude can be considerable, e.g., for dichalcogenides of transition metals belonging to the same spatial symmetry group. But it is found to be small for crystalline graphite and single-layer graphene because of a low spin-orbit interaction energy for carbon atoms and, as a consequence, carbon structures.