

УДК 536. 75: 548. 5

## МАЛЫЕ ПРЕДСТАВЛЕНИЯ ГРУПП В КУБИЧЕСКОЙ И ТЕТРАГОНАЛЬНОЙ КРИСТАЛЛИЧЕСКИХ РЕШЁТКАХ

Ю. М. Смирнов

Тверской государственный университет  
кафедра прикладной физики

В качестве модели рассмотрена примитивная решётка титаната бария. На этой основе определены возможности потенциальных фазовых переходов в кристаллической группе парателлуриата (диоксида теллура).

**Ключевые слова:** *прафаза, малые представления, титанат бария, парателлуриат*

**Введение.** Как модельное вещество для изучения малых представлений выбран титанат бария, имеющий пространственную группу  $Rm\bar{3}m$  ( $O_h^1$ ). Это вещество испытывает при понижении температуры три фазовых перехода:  $O_h - C_{4v} - C_{2v} - C_{3v}$ . Его высокотемпературная параэлектрическая фаза имеет кристаллическую структуру типа перовскита. Хотя ион кальция находится в центре ячейки, он не входит в систему трансляций, и ячейка относится к примитивным.

**Малые представления в кубической решётке.** Примитивная кубическая решётка наиболее проста для рассмотрения. Структурные единицы (узлы) в ней расположены в вершинах ячейки, форма элементарной ячейки – куб, рёбра равны между собой:  $\mathbf{a} = \mathbf{b} = \mathbf{c}$ , углы между рёбрами – прямые:  $\alpha = \beta = \gamma = \pi/2$ . В неорганическом мире кристаллы планаксиального вида кубической сингонии находятся на третьем месте по количеству из 32 кристаллографических групп. В то же время, например, среди металлов кубической сингонии лишь один относится к примитивной группе Браве этой сингонии –  $\alpha$ -Pо, да и он лишь после ФП 2 рода, происходящего при 309 К.

Энергетика ячейки связана с её симметрией. Максимальная симметрия волновой функции реализована в центре первой зоны Бриллюэна. Группой волнового вектора  $G_k$  является совокупность элементов группы  $G$ , оставляющей его неизменным при любых операциях симметрии группы  $G_k$ . В то же время неприводимые представления волновых функций не всегда полностью соответствуют представлениям полной группы  $G$ . Сосуществующие в одной энергетической зоне состояния называются совместными. Определение осуществляется сравнением симметрии на определённой оси с симметрией точки на этой оси. В примитивном кубе имеются три четверных поворотных оси 4: ( $\Delta$ )  $\langle 100 \rangle$ , четыре тройных оси 3: ( $\Lambda$ )

$\langle 111 \rangle$  и шесть поворотных осей 2:  $(\Sigma)$   $\langle 110 \rangle$ . Попарные пересечения осей определяют положения плоскостей зеркального отражения  $m$ :  $\Delta\Lambda$ ,  $\Delta\Sigma$ , и  $\Lambda\Sigma$ .

Малая группа  $G_{\Delta} (\Delta)$  включает в себя четверную поворотную ось и проходящие через неё четыре плоскости зеркального отражения, что соответствует группе  $C_{4v}$ . Представления группы приведены в табл. 1.

Т а б л и ц а 1. Неприводимые представления группы  $C_{4v}^* (\Delta)$

$C_{4v}$	E	$2C_4$	$C_2^2$	$2\sigma_v$	$2\sigma_d$
$\Delta_1$	1	1	1	1	1
$\Delta_2$	1	-1	1	1	-1
$\Delta_3$	1	-1	1	-1	1
$\Delta_4$	1	1	1	-1	-1
$\Delta_5$	2	0	-2	0	0

Отметим, что группа в данном случае является подгруппой группы  $O_h (m\bar{3}m)$ .

Малая группа  $G_{\Lambda} (\Lambda)$  включает в себя тройную поворотную ось. В группу  $\Lambda$  входят три диагональные плоскости  $\sigma_d$ , содержащие три прилегающие к оси  $\Lambda$  ребра. Группа соответствует группе  $C_{3v}$ . Представления группы приведены в табл. 2. В этом случае группа тоже является подгруппой группы  $O_h (m\bar{3}m)$ .

Т а б л и ц а 2. Неприводимые представления группы  $C_{3v} (\Lambda)$

$C_{3v} (\Lambda)$	E	$2C_3$	$3\sigma_v$
$\Lambda_1$	1	1	1
$\Lambda_2$	1	1	-1
$\Lambda_3$	2	-1	0

Малая группа  $G_{\Sigma} (\Sigma)$  включает в себя двойную поворотную ось и две плоскости зеркального отражения  $\sigma_h$  и  $\sigma_d$ . Группа соответствует группе  $C_{2v}$ . Представления группы приведены в табл. 3.

Т а б л и ц а 3. Неприводимые представления группы  $C_{2v} (\Sigma)$

$C_{2v} (\Sigma)$	E	$C_2$	$\sigma_h$	$\sigma_d$
$\Sigma_1$	1	1	1	1
$\Sigma_2$	1	1	-1	-1
$\Sigma_3$	1	1	-1	1
$\Sigma_4$	1	1	1	-1

Группа является подгруппой группы  $O_h$ .

Перейдём к анализу малых представлений для парателлуриита (диоксида теллура). Парателлуриит, имеющий ячейку с

\* Символы операций приводятся по Вустеру {1}.

пространственной группой  $P4_12_12$  (или  $P4_32_12$ ) считается удвоенной или несколько искажённой структурой типа рутила. Рутил имеет тетрагональную сингонию с пространственной группой  $P4mm$  ( $D_{4h}^{14}$ ). Эту группу можно считать гипотетической прафазой для потенциальных модификаций диоксида теллура. В соответствии со справочником Ковалёва [1] такие структуры могут переходить в низкосимметричные группы вида 4 или 2. В то же время соотношения совместности предполагают и иные возможности. Рассмотрим сопоставления неприводимых групп, начиная с группы  $D_4$  (422).

Таблица 4. Группа  $D_4$

$D_4$ (422)	E	$2C_4$	$C_2(C_4^2)$	$2C_2'$	$2C_2''$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
E	2	0	-2	0	0

Таблица 5. Группа  $D_2$

$D_2$ (222)	E	-	$C_{2z}$	$C_{2y}$	$C_{2x}$
A	1	-	1	1	1
$B_2$	1	-	-1	1	-1
$B_1$	1	-	1	-1	-1
$B_3$	1	-	-1	-1	1

Таблица 6. Группа  $C_4$  (4)

$C_4$ (4)	E	$C_4$	$C_2$	-	-	$C_4^3$
A	1	1	1	-	-	1
B	1	-1	1	-	-	-1
E	1	i	-1	-	-	-i
E	1	-i	-1	-	-	i

Таблица 7. Группа  $C_2$  (2)

$C_2$ (2)	E	-	-	-	$C_{2x}$
A	1	-	-	-	1
B	1	-	-	-	-1

Анализ таблиц 4 – 7 позволяет определить наличие соотношений совместности между группами  $D_4$  и  $D_2$  и подтвердить эти соотношения для  $D_4$  и  $C_4$ , а также для групп  $D_4$  и  $C_2$ . Следует учесть, что представление E для группы  $C_4$  считается «смешанным». Оно распадается на два одномерных представления. Их сумма входит в соотношения совместности групп  $D_4$  и  $C_4$ . Поэтому следует предполагать, что при определённых термодинамических условиях переход  $D_4 - C_4$  возможен. Наконец, нельзя исключать возможность перехода  $D_4 - C_2$  (представления  $A_2$  или  $B_1$  соответственно). Или –

ступенчатого перехода (в современной терминологии – «лестницы»)  $D_4 - D_2 - C_2$  (представления  $B_2$  или  $B_1 - B$ ).

### **Список литературы**

1. Вустер У. Применение тензоров и теории групп для описания физических свойств кристаллов. М. «Мир». 1977. 384 с.
2. Ковалёв О.В. Неприводимые и индуцированные представления и копредставления фёдоровских групп. М. «Наука». 1986. 368 с.
3. Mirgorodski A.P., Merle-Merjean T., Champarhaud J.-C., Thomas P., Frit B. Dynamics and structure of  $TeO_2$  polymorphs // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2000. V. 83. P. 501–509.

## **MINOR GROUP REPRESENTATION IN CUBIC AND TETRAGONAL CRYSTAL LATTICES**

**Yu. M. Smirnov**

Tver State University  
*Chair of Applied Physics*

A primitive crystal lattice of barium titanate was chosen to serve as a model. On this basis the possible potential phase transitions in the paratellurite (tellurium dioxide) crystal group are characterized.

**Keywords:** *praphase, minor representations, barium titanate, paratellurite*

*Об авторах:*

СМИРНОВ Юрий Мстиславович – доктор технических наук, профессор, заведующий кафедрой прикладной физики ТвГУ, 170100, г. Тверь, ул. Желябова, 33, *e-mail:* [yu.smirnoff@tversu.ru](mailto:yu.smirnoff@tversu.ru).