Wieslawa Sikora, November 2006

Examples of interpretation of MODY results

```
SYMMETRY OPERATIONS IN International SET:
----------------------------------------------------

Space group G: 62  D_2h_16   {P n m a}              ATOMS at( 0,0,1/2)
Type of cell= P

Wave vector: k=(0 0 0 )  k=(0,000 0,000 0,000)

Symmetry operations without lattice translations
(Set of translational coset representants) of G  (8) :
1, 2, 3, 4, 25, 26, 27, 28,

Symmetry operations without lattice translations
(Set of translational coset representants) of G(k1) (8) :
1, 2, 3, 4, 25, 26, 27, 28,


Elements used as basic generators: 1, 2, 3, 25
t(1,0,0), t(0,1,0),  t(0,0,1)

--- Augmented matrix representations of symmetry operations of G ---


element 1  (e)      element 2  (2y)      element 3  (2x)      element 4  (2z)
| 1  0  0  0,00|    |-1  0  0  0,00|     | 1  0  0  0,50|     |-1  0  0  0,50|
| 0  1  0  0,00|    | 0  1  0  0,50|     | 0 -1  0  0,50|     | 0 -1  0  0,00|
| 0  0  1  0,00|    | 0  0 -1  0,00|     | 0  0 -1  0,50|     | 0  0  1  0,50|
| 0  0  0  1,00|    | 0  0  0  1,00|     | 0  0  0  1,00|     | 0  0  0  1,00|


element 25  (I)     element 26  (my)     element 27  (mx)     element 28  (mz)
|-1  0  0  0,00|    | 1  0  0  0,00|     |-1  0  0  0,50|     | 1  0  0  0,50|
| 0 -1  0  0,00|    | 0 -1  0  0,50|     | 0  1  0  0,50|     | 0  1  0  0,00|
| 0  0 -1  0,00|    | 0  0  1  0,00|     | 0  0  1  0,50|     | 0  0 -1  0,50|
| 0  0  0  1,00|    | 0  0  0  1,00|     | 0  0  0  1,00|     | 0  0  0  1,00|
```

```
**** ATOMS POSITIONS IN International SET ****
Space group G: 62  D_2h_16   {P n m a}
Type of cell= P

First atom:  x=0,000;   y=0,000;   z=0,500

Latice Translation:  tx=0; ty=0; tz=0

Wave vector: k=(0 0 0 )  k=(0,000 0,000 0,000)

Number of atoms in elementary cell = 4
Number of orbits of G(k1)= 1

--- Positions of atoms: ---
Atom 1 :  (0,000 0,000 0,500)
Atom 2 :  (0,000 0,500 0,500)
Atom 3 :  (0,500 0,500 0,000)
Atom 4 :  (0,500 0,000 0,000)

--- Positions of atoms separated into orbits of G(k1): ---

atom       atom coordinates   how to get
------------------------------------------------------------
Orbit G(k1): 1
set of atoms in orbit G(k1): 4
Atom 1 :  (0,000 0,000 0,500) Atom 1 * element(1)
Atom 2 :  (0,000 0,500 0,500) Atom 1 * element(2)
Atom 3 :  (0,500 0,500 0,000) Atom 1 * element(3)
Atom 4 :  (0,500 0,000 0,000) Atom 1 * element(4)

Sites transforms from International to Kovalev system as:
    | 0,00  1,00  0,00  0,25|
K = | 1,00  0,00  0,00  0,25| I

    | 0,00  0,00  1,00  0,00|
    | 0,00  0,00  0,00  1,00|

Sites transforms from Kovalev to International system as:
    | 0,00  1,00  0,00 -0,25|
I = | 1,00  0,00  0,00 -0,25| K
    | 0,00  0,00  1,00  0,00|
    | 0,00  0,00  0,00  1,00|
```

```
**** REPRESENTATIONS REPORT IN KOVALEV SET ****
-----------------------------------------------
Space group G: 62  D_2h_16   {P n m a}
Wave vector in Kovalev set:          k=(0 0 0 )
Wave vector in Kovalev primitiv set: k=(0 0 0 )
Wave vector in International set:    k=(0 0 0 )

Number of representations: 8

Symmetry operations without lattice translations
(Set of translational coset representants) of G(k1)  (8) :
1, 2, 3, 4, 25, 26, 27, 28,
----------------------------------------------
Tau: 1
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2: 1,00   3: 1,00   4: 1,00  25: 1,00  26: 1,00  27: 1,00  28: 1,00


Tau: 2
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2: 1,00   3: 1,00   4: 1,00  25:-1,00  26:-1,00  27:-1,00  28:-1,00


Tau: 3
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2: 1,00   3:-1,00   4:-1,00  25: 1,00  26: 1,00  27:-1,00  28:-1,00


Tau: 4
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2: 1,00   3:-1,00   4:-1,00  25:-1,00  26:-1,00  27: 1,00  28: 1,00


Tau: 5
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2:-1,00   3: 1,00   4:-1,00  25: 1,00  26:-1,00  27: 1,00  28:-1,00


Tau: 6
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2:-1,00   3: 1,00   4:-1,00  25:-1,00  26: 1,00  27:-1,00  28: 1,00


Tau: 7
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2:-1,00   3:-1,00   4: 1,00  25: 1,00  26:-1,00  27:-1,00  28: 1,00


Tau: 8
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: 1,00   2:-1,00   3:-1,00   4: 1,00  25:-1,00  26: 1,00  27: 1,00  28:-1,00
```

```
**** AXIAL VECTOR (magnetic) MODES REPORT IN INTERNATIONAL SET ****
---------------------------------------------------------------
Space group G: 62  D_2h_16   {P n m a}
Type of cell= P

First atom:  x=0,000;   y=0,000;   z=0,500

Latice Translation:  tx=0; ty=0; tz=0

Wave vector: k=(0 0 0 )  k=(0,000 0,000 0,000)

Arm of the k-vector star: k1=( 0,000 0,000 0,000)

__________________________________________________________________________
MODES for Orbit G(k1) 1
(consisting of 4 atoms)
__________________________________________________________________________

***********************************************************
**** REPRESENTATION tau 1,  dim 1,  occurring 3 times ****

                x      y      z
1:  Atom 1: (0,000 0,000 0,500) -----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)  Z = R + iI =C(cosφ+ isinφ)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)
               Rx     Ix     Ry     Iy     Rz     Iz    ver:1 = Ψ_1^1
                                                        ver:2 = Ψ_1^2
                                                        ver:3 = Ψ_1^3
2:  Atom 2: (0,000 0,500 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)

3:  Atom 3: (0,500 0,500 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)

4:  Atom 4: (0,500 0,000 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)


**** REPRESENTATION tau 2,  dim 1,   No Occurrence ****

***********************************************************
```

$$M_1 = c_1^1\Psi_1^1 + c_1^2\Psi_1^2 + c_1^3\Psi_1^3$$

```
**** REPRESENTATION tau 3,  dim 1,  occurring 3 times ****

1:  Atom 1: (0,000 0,000 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)
```

$M_3 = d_1^1\Psi_1'^1 + d_1^2\Psi_1'^2 + d_1^3\Psi_1'^3$

```
2:  Atom 2: (0,000 0,500 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)

3:  Atom 3: (0,500 0,500 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)

4:  Atom 4: (0,500 0,000 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)


**** REPRESENTATION tau 4,  dim 1,   No Occurrence ****

************************************************************

**** REPRESENTATION tau 5,  dim 1,  occurring 3 times ****

1:  Atom 1: (0,000 0,000 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)
```

$M_5 = u_1^1\Psi_1''^1 + u_1^2\Psi_1''^2 + u_1^3\Psi_1''^3$

```
2:  Atom 2: (0,000 0,500 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)

3:  Atom 3: (0,500 0,500 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)

4:  Atom 4: (0,500 0,000 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)


**** REPRESENTATION tau 6,  dim 1,   No Occurrence ****
************************************************************
```

```
**** REPRESENTATION tau 7,  dim 1,  occurring 3 times ****

1:  Atom 1: (0,000 0,000 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)
```

$$M_7 = v_1^1 \Psi_1^{\prime\prime\prime 1} + v_1^2 \Psi_1^{\prime\prime\prime 2} + v_1^3 \Psi_1^{\prime\prime\prime 3}$$

```
2:  Atom 2: (0,000 0,500 0,500)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 ( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)

3:  Atom 3: (0,500 0,500 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)

4:  Atom 4: (0,500 0,000 0,000)
-----------------------------------------------
ver: 1 |  1 ( 0,00  0,00)(-1,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 2 |  1 (-1,00  0,00)( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)
ver: 3 |  1 ( 0,00  0,00)( 0,00  0,00)( 1,00  0,00)


**** REPRESENTATION tau 8,  dim 1,   No Occurrence ****
```

Possible models of the ordering of magnetic moments

$$\vec{M} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1^x \\ m_1^y \\ m_1^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_2^x \\ m_2^y \\ m_2^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_3^x \\ m_3^y \\ m_3^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_4^x \\ m_4^y \\ m_4^z \end{bmatrix} \end{bmatrix} : \quad \vec{M}_1 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} c_1^2 \\ c_1^1 \\ c_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -c_1^2 \\ c_1^1 \\ -c_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} c_1^2 \\ -c_1^1 \\ -c_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -c_1^2 \\ -c_1^1 \\ c_1^3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}, \vec{M}_3 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} d_1^2 \\ d_1^1 \\ d_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -d_1^2 \\ d_1^1 \\ -d_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -d_1^2 \\ d_1^1 \\ d_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} d_1^2 \\ d_1^1 \\ -d_1^3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}, \vec{M}_5 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} u_1^2 \\ u_1^1 \\ u_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} u_1^2 \\ -u_1^1 \\ u_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} u_1^2 \\ -u_1^1 \\ -u_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} u_1^2 \\ u_1^1 \\ -u_1^3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}, \quad \vec{M}_7 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} v_1^1 \\ v_1^2 \\ v_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} v_1^1 \\ -v_1^2 \\ v_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -v_1^1 \\ v_1^2 \\ v_1^3 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -v_1^1 \\ -v_1^2 \\ v_1^3 \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$