

**** REPRESENTATIONS REPORT IN KOVALEV SET ****

Space group G: 62 D_{2h}16 {P n m a}
Wave vector in Kovalev set: k=(0 x 0)
Wave vector in Kovalev primitiv set: k=(0 x 0)
Wave vector in International set: k=(x 0 0)

Number of representations: 4

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

Tau: 1
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
1:(1,00 0,00) 3:(0,86 -0,51) 26:(1,00 0,00) 28:(0,86 -0,51)

Tau: 2
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
1:(1,00 0,00) 3:(0,86 -0,51) 26:(-1,00 0,00) 28:(-0,86 0,51)

Tau: 3
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
1:(1,00 0,00) 3:(-0,86 0,51) 26:(1,00 0,00) 28:(-0,86 0,51)

Tau: 4
dimension: 1
type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
1:(1,00 0,00) 3:(-0,86 0,51) 26:(-1,00 0,00) 28:(0,86 -0,51)

```
**** 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

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

Wave vector: k=(x 0 0 )   k=(0,170 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 :  (0,500 0,500 0,000)
Atom 3 :  (0,000 0,500 0,500)
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 :  (0,500 0,500 0,000) Atom 1 * element(3)
Atom 3 :  (0,000 0,500 0,500) Atom 1 * element(26)
Atom 4 :  (0,500 0,000 0,000) Atom 1 * element(28)

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|
```

Remark:

The sequence of atoms given for this example differs in the OUTPUT of MODY from the sequence done at the previous examples!

It follows from the different group of \mathbf{k} vector $G(\mathbf{k})$ for $\mathbf{k}=(x,0,0)$ then for $\mathbf{k}=(0,0,0)$ and $\mathbf{k}=(1/2,0,0)$ (which are the same). The program uses for the calculation of atom positions from the position chosen by user, the symmetry elements in the sequence as given in the $G(\mathbf{k})$.

This sequence is used in all the next results of this session!

**** 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

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

Wave vector: k=(x 0 0) k=(0,170 0,000 0,000)

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

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

---- k1 =(0,17 0,00 0,00) ----

---- k2 =(-0,17 0,00 0,00) ----

1: Atom 1: (0,000 0,000 0,500)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(1,00 0,00)(0,00 0,00)	(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)	(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)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(1,00 0,00)

2: Atom 2: (0,500 0,500 0,000)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(-0,86 -0,51)(0,00 0,00)	(0,00 0,00)(-0,86 0,51)(0,00 0,00)
ver: 2	1 (0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)	(0,86 -0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)
ver: 3	1 (0,00 0,00)(0,00 0,00)(-0,86 -0,51)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(-0,86 0,51)

3: Atom 3: (0,000 0,500 0,500)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(1,00 0,00)(0,00 0,00)	(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)	(-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)	(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)(-0,86 -0,51)(0,00 0,00)	(0,00 0,00)(-0,86 0,51)(0,00 0,00)
ver: 2	1 (-0,86 -0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)	(-0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)
ver: 3	1 (0,00 0,00)(0,00 0,00)(0,86 0,51)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(0,86 -0,51)

**** REPRESENTATION tau 2, dim 1, occurring 3 times ****

---- k1 =(0,17 0,00 0,00) ----

---- k2 =(-0,17 0,00 0,00) ----

1: Atom 1: (0,000 0,000 0,500)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(1,00 0,00)(0,00 0,00)	(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)	(-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)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(-1,00 0,00)

2: Atom 2: (0,500 0,500 0,000)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(-0,86 -0,51)(0,00 0,00)	(0,00 0,00)(0,86 -0,51)(0,00 0,00)
ver: 2	1 (0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)	(-0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)
ver: 3	1 (0,00 0,00)(0,00 0,00)(-0,86 -0,51)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(0,86 -0,51)

3: Atom 3: (0,000 0,500 0,500)

ver: 1	1 (0,00 0,00)(-1,00 0,00)(0,00 0,00)	(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)	(-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)	(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)(0,86 0,51)(0,00 0,00)	(0,00 0,00)(-0,86 0,51)(0,00 0,00)
ver: 2	1 (0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)	(-0,86 0,51)(0,00 0,00)(0,00 0,00)
ver: 3	1 (0,00 0,00)(0,00 0,00)(-0,86 -0,51)	(0,00 0,00)(0,00 0,00)(0,86 -0,51)

```

*****
*** REPRESENTATION tau 3, dim 1, occurring 3 times ***
----- k1 =( 0,17 0,00 0,00) -----
----- k2 =( -0,17 0,00 0,00) -----

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

2: Atom 2: (0,500 0,500 0,000)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,86 0,51)( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)
ver: 2 | 1 (-0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00) (-0,86 0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)
ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)( 0,86 0,51) ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)( 0,86 -0,51)

3: Atom 3: (0,000 0,500 0,500)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00)( 1,00 0,00)( 0,00 0,00) ( 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) (-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) ( 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)( 0,86 0,51)( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)
ver: 2 | 1 ( 0,86 0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00) ( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)
ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)(-0,86 -0,51) ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)(-0,86 0,51)

*****
*** REPRESENTATION tau 4, dim 1, occurring 3 times ***
----- k1 =( 0,17 0,00 0,00) -----
----- k2 =( -0,17 0,00 0,00) -----

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

2: Atom 2: (0,500 0,500 0,000)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,86 0,51)( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)(-0,86 0,51)( 0,00 0,00)
ver: 2 | 1 (-0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00) ( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)
ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)( 0,86 0,51) ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)(-0,86 0,51)

3: Atom 3: (0,000 0,500 0,500)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00)(-1,00 0,00)( 0,00 0,00) ( 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) (-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) ( 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)(-0,86 -0,51)( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)
ver: 2 | 1 (-0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00) ( 0,86 -0,51)( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)
ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)( 0,86 0,51) ( 0,00 0,00)( 0,00 0,00)(-0,86 0,51)

```

Vector $k=(x, 0, 0)$, $x=0.17$ which means, that the new structure is incommensurate with crystal lattice.

$$k \cdot t = x b_1 \cdot (n_1 t_1 + n_2 t_2 + n_3 t_3)$$

The positions of atoms 2 and 4 differs in the x-direction from position of atom 1 about $1/2 t_1$. From this in the “wave” of the new structure appears the phase shift and the modes at these positions (the parts of basis vector related to given position) are multiplied by the phase factor $e^{i\pi x}$ in comparison with the mode at position 1. . Additionally the changes of signs following from the transformations different than translations may appear.

For $x = 0.17$ we get $e^{i\pi x} = \cos(\pi x) + i \sin(\pi x) = 0.86 + i 0.51$

The possible models of the magnetic moment ordering may be getting by the linear combination of basis vectors with mixing coefficients as given below:

$$M_1 = ce^{i\varphi} \Psi_{1k}^1 + ce^{-i\varphi} \Psi_{1(-k)}^1$$

$$M_2 = de^{i\psi} \Psi_{1k}^2 + de^{-i\psi} \Psi_{1(-k)}^2$$

$$M_3 = ue^{i\theta} \Psi_{1k}^3 + ue^{-i\theta} \Psi_{1(-k)}^3$$

For τ_1 :

$$\vec{M} = \begin{bmatrix} m_1^x \\ m_1^y \\ m_1^z \\ m_2^x \\ m_2^y \\ m_2^z \\ m_3^x \\ m_3^y \\ m_3^z \\ m_4^x \\ m_4^y \\ m_4^z \end{bmatrix}, \quad \vec{M}_1 = \begin{bmatrix} 0 \\ 2c \cos \varphi \\ 0 \\ 0 \\ -2c \cos(\varphi + \pi x) \\ 0 \\ 0 \\ 2c \cos \varphi \\ 0 \\ 0 \\ -2c \cos(\varphi + \pi x) \\ 0 \end{bmatrix}, \quad \vec{M}_2 = \begin{bmatrix} 2d \cos \psi \\ 0 \\ 0 \\ 2d \cos(\psi + \pi x) \\ 0 \\ 0 \\ -2d \cos \psi \\ 0 \\ 0 \\ -2d \cos(\psi + \pi x) \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix},$$

$$\vec{M}_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2u \cos \theta \\ 0 \\ 0 \\ -2u \cos(\theta + \pi x) \\ 0 \\ 0 \\ -2u \cos \theta \\ 0 \\ 0 \\ 2u \cos(\theta + \pi x) \end{bmatrix}$$

Different representations follow to the structures with different + - sequences.