

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

 Space group G: 62 D_2h_16 {P n m a}
 Wave vector in Kovalev set: k=(0 1/2 0)
 Wave vector in Kovalev primitiv set: k=(0 1/2 0)
 Wave vector in International set: k=(1/2 0 0)

Number of representations: 2

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: 2
 type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: | (1,00 0,00) (0,00 0,00) | 2: | (0,00 0,00) (0,00 -1,00) |
 | (0,00 0,00) (1,00 0,00) | | (0,00 1,00) (0,00 0,00) |
 3: | (0,00 -1,00) (0,00 0,00) | 4: | (0,00 0,00) (1,00 0,00) |
 | (0,00 0,00) (0,00 1,00) | | (1,00 0,00) (0,00 0,00) |
 25: | (0,00 0,00) (0,00 -1,00) | 26: | (1,00 0,00) (0,00 0,00) |
 | (0,00 1,00) (0,00 0,00) | | (0,00 0,00) (1,00 0,00) |
 27: | (0,00 0,00) (1,00 0,00) | 28: | (0,00 -1,00) (0,00 0,00) |
 | (1,00 0,00) (0,00 0,00) | | (0,00 0,00) (0,00 1,00) |

Tau: 2
 dimension: 2
 type: equivalent to real representation, Herring coefficient: 1
 1: | (1,00 0,00) (0,00 0,00) | 2: | (0,00 0,00) (0,00 -1,00) |
 | (0,00 0,00) (1,00 0,00) | | (0,00 1,00) (0,00 0,00) |
 3: | (0,00 -1,00) (0,00 0,00) | 4: | (0,00 0,00) (1,00 0,00) |
 | (0,00 0,00) (0,00 1,00) | | (1,00 0,00) (0,00 0,00) |
 25: | (0,00 0,00) (0,00 1,00) | 26: | (-1,00 0,00) (0,00 0,00) |
 | (0,00 -1,00) (0,00 0,00) | | (0,00 0,00) (-1,00 0,00) |
 27: | (0,00 0,00) (-1,00 0,00) | 28: | (0,00 1,00) (0,00 0,00) |
 | (-1,00 0,00) (0,00 0,00) | | (0,00 0,00) (0,00 -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
 Lattice Translation: tx=0; ty=0; tz=0
 Wave vector: k=(1/2 0 0) k=(0,500 0,000 0,000)
 Arm of the k-vector star: k1=(0,500 0,000 0,000)

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

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

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

```
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00)  Ψ11
ver: 1 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00)  Ψ12

ver: 2 | 1 ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)  Ψ21
ver: 2 | 2 ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)  Ψ22

ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00)  Ψ31
ver: 3 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50)  Ψ32
```

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

```
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00)

ver: 2 | 1 (-0,50 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)
ver: 2 | 2 ( 0,00 0,50) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) (-0,50 0,00)
ver: 3 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,50)
```

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

```
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00)

ver: 2 | 1 ( 0,00 0,50) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)
ver: 2 | 2 (-0,50 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50)
ver: 3 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00)
```

4: Atom 4: (0,500 0,000 0,000)

```
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00)

ver: 2 | 1 ( 0,00 -0,50) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)
ver: 2 | 2 ( 0,50 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,50)
ver: 3 | 2 ( 0,00 0,00) ( 0,00 0,00) (-0,50 0,00)
```

$$M_1 = ice^{i\phi} \Psi_1^1 + ce^{-i\phi} \Psi_2^1$$

$$M_2 = ide^{i\psi} \Psi_1^2 + de^{-i\psi} \Psi_2^2$$

$$M_3 = iue^{i\theta} \Psi_1^3 + ue^{-i\theta} \Psi_2^3$$

```

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

1:  Atom 1: (0,000 0,000 0,500)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00)      Ψ' 11
ver: 1 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00)      Ψ' 12

ver: 2 | 1 ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)      Ψ' 21
ver: 2 | 2 ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)      Ψ' 22

ver: 3 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,50  0,00)      Ψ' 31
ver: 3 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,50)      Ψ' 32

2:  Atom 2: (0,000 0,500 0,500)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00  0,00) (-0,50  0,00) ( 0,00  0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00  0,00)

ver: 2 | 1 ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)
ver: 2 | 2 ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,50  0,00)
ver: 3 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,50)

3:  Atom 3: (0,500 0,500 0,000)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00 -0,50) ( 0,00  0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00  0,00) (-0,50  0,00) ( 0,00  0,00)

ver: 2 | 1 ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)
ver: 2 | 2 ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00 -0,50)
ver: 3 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) (-0,50  0,00)

4:  Atom 4: (0,500 0,000 0,000)
-----
ver: 1 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00)
ver: 1 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00)

ver: 2 | 1 ( 0,00  0,50) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)
ver: 2 | 2 ( 0,50  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00)

ver: 3 | 1 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) ( 0,00 -0,50)
ver: 3 | 2 ( 0,00  0,00) ( 0,00  0,00) (-0,50  0,00)

```

$$M'_1 = ic'e^{i\varphi'}\Psi'_1{}^1 - c'e^{-i\varphi'}\Psi'_2{}^1$$

$$M'_2 = -id'e^{i\psi'}\Psi'_1{}^2 + d'e^{-i\psi'}\Psi'_2{}^2$$

$$M'_3 = iu'e^{i\theta'}\Psi'_1{}^3 - u'e^{-i\theta'}\Psi'_2{}^3$$

Possible models of magnetic ordering:

For τ_1

$$\vec{M} = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1^x \\ m_1^y \\ m_1^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_2^x \\ m_2^y \\ m_2^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_3^x \\ m_3^y \\ m_3^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_4^x \\ m_4^y \\ m_4^z \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}_1 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ -2c \sin \varphi \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ -2c \sin \varphi \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 2c \cos \varphi \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 2c \cos \varphi \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}_2 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} -2d \sin \psi \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 2d \sin \psi \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} -2d \cos \psi \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 2d \cos \psi \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}_3 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2u \sin \theta \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2u \sin \theta \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2u \cos \theta \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2u \cos \theta \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$

For τ_2

$$\vec{M}' = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} m_1^x \\ m_1^y \\ m_1^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_2^x \\ m_2^y \\ m_2^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_3^x \\ m_3^y \\ m_3^z \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} m_4^x \\ m_4^y \\ m_4^z \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}'_1 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ -2c' \sin \varphi' \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 2c' \sin \varphi' \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ -2c' \cos \varphi' \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 2c' \cos \varphi' \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}'_2 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 2d' \sin \psi' \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 2d' \sin \psi' \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 2d' \cos \psi' \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 2d' \cos \psi' \\ 0 \\ 0 \end{bmatrix} \end{bmatrix} \quad \vec{M}'_3 = \begin{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2u' \sin \theta' \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ -2u' \sin \theta' \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2u' \cos \theta' \end{bmatrix} \\ \begin{bmatrix} 0 \\ 0 \\ 2u' \cos \theta' \end{bmatrix} \end{bmatrix}$$