arXiv:2611.33099v1 [cond-mat.mes-hall] 23 Nov 2026

自旋空间群与晶体磁序的分类

Zheng Zhang,[1] Peiyuan Wang,[2] 和 Y. X. Zhao[2], *[1]中国兰州*730050*，兰州理工大学理学院物理系[2]中国香港，薄扶林道，香港大学物理系及香港量子科学与技术研究所

自旋空间群（SSG）描述自旋轨道耦合可忽略时的磁性晶体，此时空间旋转与自旋旋转相互解耦。尽管已有对自旋空间群的代数枚举，但其抽象的数学方法掩盖了所得分类的物理意义，因此自旋空间群与真实空间磁序之间的直接对应关系尚未建立。在此，我们提出一种具有物理动机的自旋空间群枚举与分类框架，其依据是平移全纯——空间晶格平移群在自旋同态下的像。 $SO(3)$中的三类阿贝尔像将自旋空间群划分为三种基本平移类型。平移全纯约束了与点群元素相关的自旋操作，从而按照物理层级完整枚举自旋空间群。在此框架下，平移全纯将自旋空间群和磁序分为17种普适自旋-晶格类型，每种类型在中子衍射中都有明确无歧义的布拉格峰几何构型和极化特征。除了整理已知磁序之外，这一框架还直接预言了四种普适物理现象：（i）某些自旋晶格类型所保证的精确磁化补偿；（ii）非对易布里渊区出现的精确群论判据；（iii）一种八极矩为零的新型3Q磁序；以及（iv）由反射交错共面自旋晶格保护的严格共线动量空间自旋纹理的实现。我们还构建了一个按照这一物理层级组织的自旋空间群数据库。

引言。 对称性原理支撑着我们对晶体固体中量子相的理解 [1]。在磁性材料中，磁空间群（MSGs）传统上用于描述将晶格操作与时间反演变换相结合的对称性 [2–4]。然而，当相对论性自旋轨道耦合（SOC）可以忽略时，自旋取向便与空间坐标系解耦，此时精确的对称性由自旋空间群（SSG）描述，其中空间变换与自旋变换彼此独立地作用 [5–7]。

近年来，SSG 已成为预测非传统物理现象的重要工具 [8]，，包括交错磁性 [9–11]，、涌现拓扑激发 [12, 13]，、新颖拓扑相 [13, 14],以及许多其他现象 [15–19, 22]。近期研究还发展了 SSG 的数学枚举方法 [14, 20, 21]。在文献 [20, 21]，中，通过检索母空间群的所有正规子群来枚举 SSG。这种方法需要对正规子群的序设置截断，因此枚举结果并不完整。在文献 [14]，中，则通过利用不可约表示穷举构造母空间群的 $O(3)$表示，实现了完整枚举。然而，这两种方法在数学上都较为抽象，掩盖了 SSG 所对应磁序中蕴含的物理信息。此外，如何直观理解由此得到的数万个 SSG 的组织结构也十分困难。因此，确定给定磁序的对称群通常需要进行穷举式数据库检索 [21, 24, 25]。

相比之下，230个晶体学空间群通过建立在物理概念自然层级之上的分层分类来组织 [1, 23]，，使每个空间群的物理意义都清晰明了。平移群作用于布拉菲格子；点群及其在这些晶格上的作用决定了几何晶类；而半直积或非对称扩展则完成了这一分类。因此，建立一种以物理概念层级为基础的、自旋空间群的类似分层分类体系，是非常理想的。

在这篇快报中，我们提出了一种新的枚举方法，为自旋空间群提供了这样的分类框架。受空间群分类的启发，我们引入了一系列概念，用以描述自旋操作如何与平移和点群操作组合。我们首先考虑从晶格平移群 T 到自旋群 $O(3)$ 的同态，并将其称为平移全纯。虽然每个空间群都是无限的，但它对平移子群取商后得到的点群是有限的。因此，一旦平移全纯确定，将点群元素纳入考虑就成为一个有限问题，可通过数值方法高效求解。

与平移全纯的相容性以及点群作用会施加一个协变条件，而障碍二维余循环则决定能否为点群元素赋予相容的自旋操作。当这一障碍为平凡时，通过枚举一阶上同调类即可得到所有不等价的自旋空间群。在枚举的每个阶段，数学对象及其关系都具有明确的物理含义。

利用平移全纯群，我们将晶体中的自旋空间群和磁序分为三种基本平移类型和17种普适自旋-晶格类型（表 I）。每种自旋晶格类型都对应于磁序的一种特定平移模式，并在

极化中子衍射中呈现出不同的特征。我们将晶体中已知磁序的全貌映射到这一框架中。

最后，我们直接从这一框架推导出四个普适结论：由自旋晶格类型强制的精确磁化补偿、关于非对易布里渊区的精确群论判据、一种八极矩为零的新型3Q磁序，以及共面磁体中纯共线自旋纹理的对称性保护。

反幺正分级与平移全纯。我们首先为非共面自旋空间群建立这一框架，随后将共面和共线自旋空间群视为退化情形进行处理。

对于非共面自旋空间群 $\mathcal{G}$，一般元素可写为 $\{\varrho(g)|g\}$，其中 $g=\{R_p|\boldsymbol{t}\}\in G$ 是一个空间群操作，而 $\varrho(g)\in O(3)$ 作用于磁矩场 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})$。由于非共面自旋空间群不具有非平凡的纯自旋操作，$\mathcal{G}\cong G$。因此，对于给定母空间群 G，枚举所有不等价的非共面自旋空间群，等价于对所有不等价同态 ϱ 进行分类：$G\to O(3)$。

$O(3)\cong SO(3)\times Z_2^{\mathcal{T}}$，其中 $Z_2^{\mathcal{T}}=\{E,\mathcal{P}\}$ 表示时间反演群。$\mathcal{P}=\mathrm{diag}(-1,-1,-1)$ 是自旋反演操作，由时间反演 $\mathcal{T}$ 实现。同态 ϱ 分解为

$$\varrho(g)=\chi(g)\rho(g),\quad \chi:G\to Z_2^{\mathcal{T}},\quad \rho:G\to SO(3), \tag{1}$$

其中 χ 是指定幺正或反幺正性质的 Z_2 分级，而 ρ 是从 G 到$SO(3)$ 的同态。不等价的反幺正 Z_2 分级 χ由 $H^1(G,\mathbb{Z}_2)$ 分类。剩下的任务是枚举所有不等价同态 $\rho: G\to SO(3)$。

空间群 G 是点群P 通过阿贝尔平移子群 T 扩张得到的：

$$1\to \mathrm{T}\to G\to P\to 1. \tag{2}$$

将 ϱ 限制到 T 上，定义平移全纯 $\varrho_T\equiv\varrho|_{\mathrm{T}}$，其 $SO(3)$ 部分记为 $\rho_T\equiv\rho|_{\mathrm{T}}$。由于 T 是阿贝尔群，其像 $\rho_T(\mathrm{T})$ 必须是 $SO(3)$ 的阿贝尔子群。在整体 $SO(3)$共轭意义下，$SO(3)$ 的阿贝尔子群恰有三类：

类型 0（平凡）： $\rho_T(\mathrm{T})=\{E\}$。

类型 1（单轴）： $SO(2)$ 的子群，由绕固定 z轴的旋转生成。

类型 2（双轴）： 克莱因四元群 $V_4=\{E,R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}$。

因此，平移全纯将自旋空间群分类为三种基本平移类型。

非共面自旋空间群的枚举。任意 G中的元素均可分解为 $g=ts(p)$，其中 $s(p)=\{R_p|\boldsymbol{\tau}_p\}$是 $p\in P$ 在G中的点群操作的一个选定截面，其中 $\boldsymbol{\tau}_p$ 是分数平移，而 $\boldsymbol{t}\in\mathrm{T}$ 是纯平移。同态条件 $\rho(g_1)\rho(g_2)=\rho(g_1g_2)$化简为

$$\rho_T(\boldsymbol{t}_1)\rho_T(\boldsymbol{t}_2)=\rho_T(\boldsymbol{t}_1+\boldsymbol{t}_2), \tag{3}$$
$$\rho(s(p))\rho_T(\boldsymbol{t})\rho(s(p))^{-1}=\rho_T(R_p\boldsymbol{t}), \tag{4}$$
$$\rho(s(p_1))\rho(s(p_2))=\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})\rho(s(p_1p_2)), \tag{5}$$

其中，L 是与 T 相关的布拉菲格子，而$\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2}\in L$ 是由 $\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2}=\boldsymbol{\tau}_{p_1}+R_{p_1}\boldsymbol{\tau}_{p_2}-\boldsymbol{\tau}_{p_1p_2}$定义的二余循环。

由于 T 在 G 中是正规子群，$\rho_T(\mathrm{T})$ 在 $\rho(G)$ 中也是正规子群，这要求 $\rho(G)\subseteq N_{SO(3)}(\rho_T(\mathrm{T}))$，其中 $N_{SO(3)}$是 $SO(3)$ 中的正规化子。现在我们分析三种平移类型：

类型 *0*。此处 $\rho_T(\mathrm{T})=\{E\}$，因此 $N_{SO(3)}(\{E\})=SO(3)$。所以，ρ完全由同态ρ_P：$P\to SO(3)$ 决定，并由 $\mathrm{Hom}(P,SO(3))$ 分类。加入反幺正分级 χ 后，即完成枚举。当 $\chi_T\equiv\chi|_{\mathrm{T}}$ 平凡时，母空间群为 G 的0型自旋空间群与关联于 P [7] 的自旋点群一一对应。

类型 *1*。此处 $\rho_T(\mathrm{T})\subset SO(2)$，因此由平移诱导的自旋旋转共享一个 z 轴。根据式（3），ρ_T具有如下形式

$$\rho_T(\boldsymbol{t})=e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}, \tag{6}$$

其中，$\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3/\widehat{L}\equiv\mathrm{BZ}$（$\boldsymbol{k}\neq\boldsymbol{0}$）表示磁传播波矢。$\rho_T(\mathrm{T})$ 在$SO(3)$ 中的正规化子为 $N(\rho_T(\mathrm{T}))=SO(2)\rtimes\{E,R_x(\pi)\}\cong SO(2)\rtimes C_{2v}$。对于任意 $s(p)\in G$，$\rho(s(p))$ 可分解为

$$\rho(s(p))=e^{-i\theta(s(p))J_z}[R_x(\pi)]^{(1-\eta_p)/2}, \tag{7}$$

其中 $\eta:\ P\to\{\pm1\}$ 是一个 $\mathbb{Z}_2$ 同态；$\eta_p=1(-1)$ 表示 p 保持（反转）z轴的取向。式（4）中的相容条件要求

$$R_p\boldsymbol{k}=\eta_p\boldsymbol{k}\pmod{\widehat{L}},\quad\forall p\in P. \tag{8}$$

我们将此方程称为平移全纯的协变条件。给定 η，它对传播波矢 $\boldsymbol{k}$ 加以约束。

此外，式（5）要求分配给每个点群截面的相 $\theta(s(p))$满足

$$\theta(s(p_1))+\eta_{p_1}\theta(s(p_2))=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}+\theta(s(p_1p_2))\pmod{2\pi}. \tag{9}$$

因此，$\theta(s(p))$ 定义了一个因子系为 $\nu_{\boldsymbol{k}}(p_1,p_2)=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}}$ 的一维余表示。我们称式（9）为点群元素的受阻 1-余循环方程。有效解要求障碍$_{\nu_{\boldsymbol{k}}}\in H^{2,\,\eta}(P,U(1))$ 为平凡，即 $[\nu_{\boldsymbol{k}}]=1$；这对 $\boldsymbol{k}$ 的允许取值施加了额外的选择定则。一旦 $[\nu_{\boldsymbol{k}}]=1$，相位 $\theta(s(p))$ 由 $H^{1,\,\eta}(P,U(1))$ 分类。为枚举所有 1 型自旋空间群，我们确定所有有效的 η，找出兼容的波矢 $\boldsymbol{k}$，求解 $\theta(s(p))$，并将结果与 χ 结合。

类型 2。这里 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong V_4$。由于 V_4 的指数为 2，平移满足 $\rho_T(2\boldsymbol{t}) = E$，由此得到

$$\rho_T(\boldsymbol{t}) = \mathrm{diag}\left(e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}}, e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}}, e^{i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}}\right), \tag{10}$$

其中 $\boldsymbol{k}_1$、$\boldsymbol{k}_2$、$\boldsymbol{k}_3 \in$ TRIM 是满足 $\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3 = \boldsymbol{0}$（模 $\widehat{L}$）的彼此不同的非零时间反演不变动量。V_4 在 $SO(3)$ 中的正规化子是手性八面体群 O，其中 $N(V_4)/V_4 \cong S_3$ 是三个相互正交的笛卡尔自旋轴的置换群。因此，ρ 可分解为 $\rho(s(p)) = D(s(p))S(p)$，其中 $D(s(p)) \in V_4$ 和 $S: P \to S_3$ 是一个同态。根据公式 (4)，点群作用必须满足以下协变条件：

$$R_p\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_{\sigma_p(i)} \pmod{\widehat{L}}, \quad \sigma_p \in S_3. \tag{11}$$

因此，点群操作必须置换波矢。公式 (5) 随后给出受阻碍的 1-余循环方程

$$D(s(p_1))\pi_{p_1}[D(s(p_2))] = \rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})D(s(p_1p_2)), \tag{12}$$

其中 $\pi_p(D) = S(p)DS(p)^{-1}$。当 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}) \in H^2{}^{,\pi}(P, V_4)$ 是平凡障碍时，方程 (12) 有解，而不等价的 D 由 $H^1{}^{,\pi}(P, V_4)$ 分类。最后，将这些解与 χ 结合，完成了类型 2 非共面自旋空间群的枚举。

枚举过程中必须合并等价的自旋空间群。枚举算法的详情见补充材料（SM）[26]。

共面和共线自旋空间群的枚举。现在我们枚举共面和共线自旋空间群。

共面自旋空间群。当自旋被限制在一个平面内时，纯自旋子群为 $\mathcal{S} = \{E, \mathcal{P}R_z(\pi)\}$。商群 $\mathcal{G}/\mathcal{S} \cong G$ 同构于一个空间群。与 $g \in G$ 相关联的自旋操作可写为 $\mathrm{diag}(\rho(g), \det \rho(g))$，其中 $\rho(g)$是从G 到 $O(2)_z$的同态。因此，共面自旋空间群也按不等价同态 $\rho: G \to O(2)_z \subset SO(3)$分类。在 $O(2)$共轭下，阿贝尔像 $\rho_T(\mathrm{T})$分为三类：

Type 0: $\rho_T(\mathrm{T}) = \{E\}$.
类型 1: $\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_z$，其中 $\rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$。
类型 2: $\rho_T(\mathrm{T}) \cong V_4 = \{E, -E, \sigma, -\sigma\}$，其中 $\sigma = \mathrm{diag}(1, -1)$，或 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong D_1 = \{1, \sigma\}$。它们在 $SO(3)$ 中的嵌入为 $V_4 = \{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}$ 和 $D_1 = \{E, R_x(\pi)\}$。

类型 0 共面自旋空间群对应于共面自旋点群。I型共面自旋空间群与带有平凡反幺正分级的 I 型非共面 SSG 一一对应。对于类型 2 共面自旋空间群，我们写作 $\rho_T(\boldsymbol{t}) = \mathrm{diag}(e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}}, e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}})$，其中 $\boldsymbol{k}_1$，$\boldsymbol{k}_2$是不同的时间反演不变动量；当 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong V_4$时二者均非零，而当 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong D_1$时其中一个为零。类型 2 共面自旋空间群可采用与非共面情形类似的方法进行枚举；详情见补充材料。

共线自旋空间群。当磁矩沿单一轴排列时，纯自旋群为 $\mathcal{S} = SO(2) \rtimes \{E, \mathcal{P}R_x(\pi)\}$，且 $\mathcal{G}/\mathcal{S} \cong G$。共线自旋空间群由同态 $\varrho: G \to O(1) = \{E, \mathcal{P}\}$ 确定，这些同态恰好是 G（对应于 I、III 和 IV 型磁空间群）的反幺正分级。在我们的全纯群框架中，所有共线自旋空间群都属于类型 0。

自旋晶格类型。空间群和晶体序可根据其晶格对称性分为 14 种布拉菲类型。对于晶体中的磁序，每个晶格点都与一组磁矩或自旋相关联；我们将由此形成的结构称为自旋晶格。同样，平移全纯像 $\varrho_T(\mathrm{T})$ 将自旋空间群和磁序分为 17 种普适自旋晶格类型（表 I）。下面，我们用一个时间反演不变波矢 χ_T 来刻画反幺正分级 $\boldsymbol{k}_\chi$：$\chi_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$。

共线自旋晶格。对于平凡的 χ_T ($\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$)，自旋构成平移不变共线晶格，涵盖铁磁体和亚铁磁体 [27], ，以及具有晶体学磁性晶胞的共线交错磁体 [9]。对于非平凡的 χ_T ($\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$)，反幺正平移会使自旋反向，从而形成交错共线自旋晶格，II 型反铁磁体（如 NiO [28]）便是此类晶格的实例。

共面自旋晶格。共面构型不具有独立的反幺正平移分级χ_T。类型 0 对应平移不变共面晶格，例如具有与晶体学晶胞相同的磁性晶胞的三角晶格和 kagome $120°$ 反铁磁体（如 Mn_3Sn、Mn_3Ge 和 $LuMnO_3$）[29–32]。

I型共面自旋空间群具有 $\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)$，其正规化子为 $SO(2) \rtimes C_2$。然而，C_2 作用于 $\rho_T(\mathrm{T})$ 时有两种不等价的方式。当波矢 $\boldsymbol{k}$ 是时间反演不变动量时，C_2 对 $\rho_T(\mathrm{T})$ 的作用是平凡的。当 $\boldsymbol{k}$ 是一般点时，C_2 的作用则是非平凡的。因此，我们将 1型自旋晶格分为两种平移类型。前者的 $\boldsymbol{k}$为时间反演不变动量，称为交错共面自旋晶格，因为某些平移会使自旋反向。后者的 $\boldsymbol{k}$为一般波矢，称为平面螺旋自旋晶格。对于平面螺旋自旋晶格，$\boldsymbol{k}$ 可以是公度或非公度的，分别对应公度或非公度磁序。代表性态包括正则平面螺旋和摆线，例如 $BiFeO_3$ [33, 34] 中的摆线，或元素稀土金属（镝、钬）中的螺旋 [35, 36]。

II型共面自旋空间群根据 $\rho_T(\mathrm{T})$ 分为两种平移类型。当 $\rho_T(\mathrm{T}) = D_1$时，$\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2$ 中的一个为零，因此非平凡的 $\rho_T(\boldsymbol{t})$ 表现为反射。我们将此类型称为反射交错共面自旋晶格。示例包括倾斜型 II 类反铁磁相中的 EuTe [37]。当 $\rho_T(\mathrm{T}) = V_4$时，$\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2$ 是不同的非零时间反演不变动量，因此两个自旋分量沿不同方向交错。我们将此类型称为双轴交错共面自旋晶格。示例包括

表 I. 自旋空间群的 17 种自旋晶格类型，根据平移全纯群 ϱ_T(T) $\subset O(n)$ 和传播波矢分类。此处，$\boldsymbol{k}_\chi$ 决定反幺正平移分级 χ_T。在本表中，TRIM 表示非零时间反演不变动量。对于类型 2 的非共面系统，$\boldsymbol{k}_i (i = 1, 2, 3)$ 是三个满足 $\sum_i \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{0}$ 的非零时间反演不变动量。

Type	波矢	自旋晶格类型	傅里叶波矢和偏振
共线			
类型 0	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$	L.0.1 平移不变共线型	在 Γ 处沿唯一自旋轴线性
	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$	L.0.2 交错共线型	在 $\boldsymbol{k}$处沿唯一自旋轴线性 χ
共面			
类型 0	$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$	P.0 平移不变共面型	面内于 Γ
类型 1 $\boldsymbol{k}$ ∈时间反演不变动量		P.1.1 交错共面型	面内于 $\boldsymbol{k}$
	$\boldsymbol{k}$ 一般	P.1.2 平面螺旋	在 $\pm\boldsymbol{k}$ 处具有相反手性的圆偏振
类型 2	$\boldsymbol{k}_1 = 0$, $\boldsymbol{k}_2 \in$ 时间反演不变动量	P.2.1 反射交错共面型	在 Γ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 处的两种正交线偏振
	$\boldsymbol{k}_1$, $\boldsymbol{k}_2 \in$ 时间反演不变动量	P.2.2 双轴交错共面型	在 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$处的两种正交线偏振
非共面			
类型 0	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$	N.0.1 平移不变非共面型	Γ处的三维极化不受限制
	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$	N.0.2 交错非共面型	$\boldsymbol{k}$处的三维极化不受限制 χ
类型 1	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{k} \in$ 时间反演不变动量	N.1.1 二分锥形	Γ处纵向； $\boldsymbol{k}$处横向
	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{k}$ 一般	N.1.2 圆锥螺旋	沿轴在 Γ处线性；在 $\pm\boldsymbol{k}$处圆偏振
	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k} \in$时间反演不变动量	N.1.3 反射交错非共面型	$\boldsymbol{k}$处纵向； Γ处横向
	$\boldsymbol{k} \in$ 时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}$ $\chi \notin \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}\}$	N.1.4 交替双分格圆锥形型	纵向位于 $\boldsymbol{k}_\chi$； 横向位于 $\boldsymbol{k}$ $\chi + \boldsymbol{k}$
	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{k}$ 一般	N.1.5 反铁磁锥形螺旋型	沿 $\boldsymbol{k}_\chi$轴线性偏振； $\boldsymbol{k}$处圆偏振 $\chi \pm \boldsymbol{k}$
类型 2	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{k}_i \in$ 时间反演不变动量	N.2.1 正交三重Q非共面型	$\boldsymbol{k}_i$处的三个正交线偏振
	$\boldsymbol{k}_i \in$ 时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}$ $\chi \in \{\boldsymbol{k}_i\}$	N.2.2 倾斜双重Q非共面型	在 $\boldsymbol{k}$处的三种正交线偏振 $\chi + \boldsymbol{k}_i$ （其中一个是 Γ）
	$\boldsymbol{k}_i \in$ 时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}$ $\chi \notin \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_i\}$	N.2.3 交错正交三重Q非共面型	在 $\boldsymbol{k}$处的三种正交线偏振 $\chi + \boldsymbol{k}_i$

$La_2O_2Fe_2OSe_2$ 非共线双相$\boldsymbol{k}$ 相 [38]以及 Ni 和 Co 取代的 $CaKFe_4As_4$ 具有刺猬型自旋涡旋晶体磁序 [39]。

非共面自旋晶格。 分级 χ_T 将类型 0 分为平移不变（$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$）和交错（$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$）非共面自旋晶格。前者存在于全入全出型烧绿石 [40, 41] 中。后者的一个例子是 $KFe_3(OH)_6(SO_4)_2$，其具有反铁磁堆叠的伞形序 [42, 43]。

对于具有 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$ 的类型 1 非共面自旋晶格，与共面情形一样，会出现两种自旋晶格类型。当$\boldsymbol{k}$ 是时间反演不变动量时，某些平移与绕某一轴的 π 旋转相关联；我们称其为双分格锥形自旋晶格。当 $\boldsymbol{k}$ 是一般点时，不同位置的自旋在圆锥面上描绘出螺旋，从而形成锥形螺旋晶格。此类的代表性例子是 MnSi 和 FeGe 在外场诱导的圆锥形相 [44, 45] 中的结构。不同于共面情形，类型 1 非共面自旋晶格可以具有 $\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$，由此产生另外三种自旋晶格类型。当 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k}$ 时，反幺正分级的调制与 π 旋转重合，从而产生沿该轴的镜面反射调制。我们称此类型为反射交错非共面自旋晶格。当 $\boldsymbol{k}_\chi$ 和 $\boldsymbol{k}$ 是两个不同的时间反演不变动量时，我们称该晶格为交替双分格锥形自旋晶格。最后，当 $\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$ 和 $\boldsymbol{k}$ 为一般点时，自旋在横向平面内螺旋运动，而其纵向分量交替变化，从而产生反铁磁序。我们称其为反铁磁锥形螺旋晶格。对于锥形螺旋和反铁磁锥形螺旋自旋晶格，$\boldsymbol{k}$ 可以是公度的，也可以是非公度的。

对于类型 2，平凡 χ_T 会产生正交三重 q 非共面晶格，其中三个正交自旋分量由 $\boldsymbol{k}_1$、$\boldsymbol{k}_2$、$\boldsymbol{k}_3$独立调制。代表性体系包括面心立方和近藤晶格中的三重-q ($3Q$)四面体非共面态（例如具有横向 3-$\boldsymbol{k}$ 序 [46]的 UO_2，以及处于 3-$\boldsymbol{k}$ 反铁磁相 [47]的 USb）。当 $\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$时，还会出现另外两种类型：倾斜 2Q 非共面晶格（$\boldsymbol{k}_\chi \in \{\boldsymbol{k}_i\}$，其中一个轴未被调制）和交错正交三重Q非共面晶格（$\boldsymbol{k}_\chi \notin \{\boldsymbol{k}_i\}$）。

中子衍射特征。 实空间磁化密度满足平移协变性条件：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}) = \varrho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}). \tag{13}$$

傅里叶展开 $\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \sum_i \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}(\boldsymbol{r})e^{i\boldsymbol{Q}_i\cdot\boldsymbol{r}}$表明，传播波矢 $\boldsymbol{Q}_i$ 及相应的自旋极化矢量由 ϱ_T 的特征系确定。如表 I所详述，17 种自旋晶格类型中的每一种都具有独特的布拉格峰位置组合 $\boldsymbol{Q}_i + \boldsymbol{G}$ 和极化分布。因此，极化中子衍射测量能够直接确定潜在的自旋晶格类型。

普适物理后果。 我们的分类框架揭示了不同磁序之间的许多普适物理后果。在此我们重点介绍四个示例；完整推导见补充材料 [26]。

磁化强度的精确补偿。 对于空间平均磁化强度 $\boldsymbol{M}$，平移协变性意味着，对于任意 $\boldsymbol{t} \in L$，都有 $\boldsymbol{M} = \varrho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{M}$。因此，平移全纯群 ϱ限制了可能的均匀磁化强度 $\boldsymbol{M}$。在我们的分类框架中，有九种自旋晶格类型要求 $\boldsymbol{M} = 0$，从而确保均匀磁化强度得到精确补偿——

它们分别是 L.0.2、P.1.1、P.1.2、P.2.2、N.0.2、N.1.4、N.1.5、N.2.1 和 N.2.3。补充材料中给出了全部 17 种自旋晶格类型的磁化强度约束的完整分析。

非对易布里渊区的精确判据。将 $\rho_T(\mathrm{T})$ 提升至旋量双覆盖 $SU(2)$ 可为自旋1/2电子产生非阿贝尔平移代数 [14]。由于 $U(1)$ 的提升仍为阿贝尔群，这一现象只会出现在类型 2 自旋空间群中，此时 V_4 的提升构成四元数群 Q_8。一般而言，晶体动量和布里渊区（BZ）是相对于幺正平移子群 $\mathrm{T}_u \equiv \ker(\chi|_{\mathrm{T}})$定义的。非对易布里渊区要求$\rho_T(\mathrm{T}_u) \cong V_4$。由此得到一个精确判据：

当且仅当某自旋空间群的自旋晶格属于双轴交错共面型（*P.2.2*）、正交 *3Q* 非共面型（*N.2.1*）或交错正交 *3Q* 非共面型（*N.2.3*）时，该自旋空间群才具有非对易布里渊区。

八极矩为零的 *3Q* 磁序。我们的分类框架预测了一种新型 3Q 磁序，即交错正交三重Q非共面自旋晶格（N.2.3）。尽管这类磁序表面上与普通正交 3Q 非共面磁序（N.2.1）相似，但它们的非线性磁响应却不同。正交 3Q 非共面晶格允许磁八极矩分量 $\mathcal{O}_{xyz} = M_x M_y M_z$ 非零，而交错正交三重Q非共面晶格则使均匀八极矩必为零。因此，可以通过二阶磁化来区分这两种 3Q 磁序。

具有共线自旋纹理的共面磁体。尽管共面磁体在实空间中具有非共线磁矩，近期关于共面奇/偶波磁性 [49–51] 的研究发现了一些态，它们具有严格共线的动量空间自旋纹理 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$。我们证明，这是具有反射交错共面自旋晶格（P.2.1）的自旋空间群的一种普遍对称性性质。对于此类型中的一个非简并能带，带有自旋操作 $R_x(\pi)$ 的平移 $\boldsymbol{t}$ 作用于 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$，要求 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = R_x(\pi)\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$。这使得 S_y, S_z 必须为零。纯自旋群要求 $S_x(\boldsymbol{k}) = S_x(-\boldsymbol{k})$。因此，自旋纹理严格共线，且具有偶宇称。补充材料中分析了全部 17 种自旋晶格类型对自旋纹理施加的约束。

讨论与结论。我们提出了一套完整的分层自旋空间群分类方案，并从磁序角度赋予其清晰的物理解释。该方案利用平移全纯将自旋空间群组织为 17 种自旋晶格类型。每种类型在动量空间和极化空间中都呈现出独特的衍射特征，从而将抽象群论与中子衍射实验直接联系起来。这种联系有望为中子衍射精修提供实用的自旋空间群框架。

除平移全纯群外，我们的框架还支持多个层级的更细致分类，具体如文末所述。我们基于这一层次分类框架构建了一个自旋空间群数据库 [52]。这些更细的层级还可以提供有关磁序的物理信息；我们将其研究留待未来开展。

致谢 Claude（Opus 5.5）协助推导了枚举算法。GPT（6 Astra、5.6 Sol、6.1 Sol）协助推导物理后果、提供材料实例，并核验了本文中的推导。代码和数据库由 GPT（6 Astra、6.1 Sol）根据作者的指示生成。Gemini（3.8 Flash）提出了本文采用的部分术语。Gemini（3.8 Flash）和 DeepSeek（4.1 Flash）协助润色文稿。

附录

附录 *A*：自旋空间群的层次分类。我们的枚举算法为自旋空间群提供了一个自然的层次分类框架。对于一个空间群 G及其平移群T 和点群P，同态 $\varrho: G \to O(n)$ 在两个群扩张之间诱导出如下态射：

$$\begin{array}{ccccccccc} 1 & \longrightarrow & \mathrm{T} & \longrightarrow & G & \longrightarrow & P & \longrightarrow & 1 \\ & & \downarrow{\scriptstyle \varrho_T} & & \downarrow{\scriptstyle \varrho} & & \downarrow{\scriptstyle \varrho_P} & & \\ 1 & \longrightarrow & \varrho_T(\mathrm{T}) & \longrightarrow & \varrho(G) & \longrightarrow & \varrho_P(P) & \longrightarrow & 1 \end{array}$$

其中 $\varrho(G) \subset N_{O(n)}(\varrho_T(\mathrm{T}))$, $\varrho_P(P) = \varrho(G)/\varrho_T(\mathrm{T})$。W
现在可以 define the foll h层级 hy of S
由于 L in $\mathbb{R}^3$中的一个空间群。首先，晶格群 T 定义了一个晶格，该晶格可分为 14 种布拉维晶格类型。自旋空间群的平移对称性由 T 和 ϱ_T决定。T 与 ϱ_T 共同指定了一个在每个格点都关联有自旋的晶格，我们称之为自旋晶格。自旋晶格的空间对称性仍可分为 14 种布拉维晶格类型。为更全面地描述自旋晶格的自旋对称性，我们引入两个新概念：平移霍洛诺米类型和自旋布拉维晶格类型。前者由 ϱ_T(T)决定，后者由 (T ϱ_T)决定。

平移霍洛诺米类型：两个自旋晶格属于同一平移霍洛诺米类型，当且仅当它们具有等价的 $\varrho_T(\mathrm{T})$。

自旋布拉维晶格类型：两个自旋晶格属于同一自旋布拉维晶格类型，当且仅当它们属于同一布拉维晶格类型，并且具有等价的 ϱ_T。

由于共线、共面和非共面自旋空间群具有不同的纯自旋群，它们的自旋晶格始终是不等价的，因此需要分别处理。

这一定义会产生无穷多种平移全纯类型。为方便起见，我们将其中某些无限类型集合归为若干族（详情见补充材料），由此定义**自旋晶格类型**这一概念。本快报定义了 17 种此类类型。

接下来，我们纳入点群对称性。在空间对称性的层面，T 和 P 共同决定算术晶体类。对于自旋空间群，我们定义另外两个概念：

自旋晶体类： 由 (ϱ_T(T) $\varrho_P(P)$) 确定。当且仅当两个 SSG 的 ϱ_T(T) 等价且 $\varrho_P(P)$ 等价时，它们属于同一自旋晶体类。

自旋算术晶体类： 由 (T P, ϱ_T, ϱ_P) 确定。当且仅当两个 SSG 属于同一算术晶体类，且它们的 ϱ_T 和 ϱ_P 等价时，它们属于同一自旋算术晶体类。

定义自旋晶体类时，应区分将 $\varrho_P(P)$ 嵌入 $N_{O(n)}$(ϱ_T(T))/ϱ_T(T) 的不等价方式。

自旋晶格类型（或平移全纯型）和自旋晶体类的概念，仅在自旋操作空间 $O(n)$内对 SSG 进行分类，而不涉及底层晶体对称性。考虑自旋操作与空间操作之间的关联后，自旋晶格类型可进一步细分为自旋布拉菲晶格类型，自旋晶体类则可进一步细分为自旋算术晶体类。

附录 B：自旋空间群数据库。我们采用本快报提出的算法枚举自旋空间群。沿用参考文献 [14],中的相同等价条件后，我们得到 1,421 个共线、9,542 个共面和 56,512 个非共面自旋空间群条目。在 67,475 个自旋空间群条目中，58,955 个属于离散群，8,520 个属于连续族，这与参考文献 [14]一致。我们将所有自旋空间群汇编至一个数据库 [52], , 并分为以下五个检索层级：

1. 母群 G。
2. 自旋构型（共线、共面或非共面）。
3. 自旋晶格类型。
4. 自旋布拉维晶格类型。
5. 自旋晶体类。

该数据库还支持对自旋空间群进行条件检索。

该数据库采用一种与参考文献 [21], 类似的自旋空间群命名方案，并与参考文献 [14]中的标签一一对应。每个自旋空间群均列有分类信息和显式矩阵。

* yuxinphy@hku.hk

[1] 《国际晶体学表》A 卷：空间群对称性，第 5 版，Th. Hahn 编（克卢维尔学术出版社，多德雷赫特，2002 年）。[2] W. Opechowski 和 R. Guccione，《磁学》，载于《磁学》，第 IIA 卷，G. T. Rado 和 H. Suhl 编（学术出版社，纽约，1965 年），第 3 章。[3] C. J. Bradley 和 A. P. Cracknell，《固体对称性的数学理论》（克拉伦登出版社，牛津，1972 年）。[4] D. B. Litvin，《磁群表》（国际晶体学联合会，切斯特，2013年）。

[5] W. F. Brinkman和R. J. Elliott，自旋空间群理论，《英国皇家学会会刊A辑》**294**，343（1966年）。[6] D. B. Litvin和W. Opechowski，自旋群，《Physica》**76**，538（1974年）。[7] D. B. Litvin，自旋点群，《晶体学报A辑》**33**，279（1977年）。[8] P. Liu、J. Li、J. Han、X. Wan和Q. Liu，具有可忽略自旋轨道耦合的磁性材料中的自旋群对称性，《物理评论X》**12**，021016（2022年）。[9] L. Šmejkal、J. Sinova和T. Jungwirth，超越传统铁磁性和反铁磁性：具有非相对论自旋和晶体旋转对称性的一个相，《物理评论X》**12**，031042（2022年）。[10] L. Šmejkal、J. Sinova和T. Jungwirth，交错磁性不断兴起的研究领域，《物理评论X》**12**，040501（2022年）。[11] L. Bai、W. Feng、S. Liu、L. Šmejkal、Y. Mokrousov和Y. Yao，交错磁性：探索磁学与自旋电子学的新前沿，《先进功能材料》**34**，2409327（2024年）。[12] A. Corticelli、R. Moessner和P. A. McClarty，自旋空间群与磁振子能带拓扑，《物理评论B》**105**，064430（2022年）。[13] X. Chen、Y. Liu、P. Liu、Y. Yu、J. Ren、J. Li、A. Zhang和Q. Liu，由自旋空间群决定的共线磁体中的非常规磁振子，《自然》**640**，349（2025年）。[14] Z. Xiao、J. Zhao、Y. Li、R. Shindou和Z.-D. Song，自旋空间群：完整分类及其应用，《物理评论X》**14**，031037（2024年）。[15] J. Yang、Z.-X. Liu和C. Fang，具有弱自旋轨道耦合的磁有序系统中准粒子的对称性不变量与类别，《自然·通讯》**15**，10203（2024年）。[16] Z. Song、A. Z. Yang、Y. Jiang、Z. Fang、J. Yang、C. Fang、H. Weng和Z.-X. Liu，自旋空间群不可约表示的构造与应用，《物理评论B》**111**，134407（2025年）。[17] X. Feng和Z. Zhang，自旋空间群中的超导序参量：方法论与应用，《物理评论B》**111**，054520（2025年）。[18] T. Kokkeler、I. Tokatly和F. S. Bergeret，非常规磁体的量子输运理论：交错磁性和p 波磁性与超导性的相互作用，《SciPost物理》**18**，178（2025年）。[19] H. Zhu、J. Li、X. Chen、Y. Yu和Q. Liu，磁几何诱导的量子几何与非线性输运，《自然·通讯》**16**，4882（2025年）。[20] Y. Jiang、Z. Song、T. Zhu、Z. Fang、H. Weng、Z.-X. Liu、J. Yang和C. Fang，自旋空间群的枚举：迈向对磁序对称性的完整描述，《物理评论X》**14**，031039（2024年）。[21] X. Chen、J. Ren、Y. Zhu、Y. Yu、A. Zhang、P. Liu、J. Li、Y. Liu、C. Li和Q. Liu，自旋空间群的枚举与表示理论，《物理评论X》**14**，031038（2024年）。[22] Y. Liu、X. Chen、Y. Yu、J. Etxebarria、J. M. Perez-Mato和Q. Liu，使用定向自旋空间群对磁序进行对称性分类，《自然》**652**，869（2026年）。[23] H. Zassenhaus，关于确定空间群的一个算法，《赫尔维蒂数学评论》**21**，117（1948年）。[24] S. V. Gallego、J. M. Perez-Mato、L. Elcoro、E. S. Tasci、R. M. Hanson、K. Momma、M. I. Aroyo和G. Madariaga，

MAGNDATA：迈向磁结构数据库。I. 公度情形，《应用晶体学杂志》49，1750（2016年）。[25] S. Zhang、Z. Song、Z. Fang、H. Weng和Z. Wang，IRSSG：用于自旋空间群的开源软件包，《计算物理学通讯》326，110190（2026年）。[26] 完整的枚举算法、共面和共线自旋空间群的分类、中子衍射特征以及普适物理后果的推导见补充材料。[27] J. M. D. Coey，《磁性与磁性材料》（剑桥大学出版社，剑桥，2010年）。[28] W. L. Roth，MnO、FeO、CoO和NiO的磁结构，《物理评论》110，1333（1958年）。[29] S. Nakatsuji、N. Kiyohara和T. Higo，室温下非共线反铁磁体中的巨大反常霍尔效应，《自然》527，212（2015年）。[30] J. J. Cederholm、Z. Xu、Y. Guo、M. Ovesen、T. Olsen、K. M. L. Krighaar、C. Knekna、J. R. Soh、Y. Lee、N. Qureshi、J. A. Rodriguez Velamazan、E. Ressouche、A. T. Boothroyd和H. Jacobsen，Mn_3Sn的基态磁结构，《物理评论B》113，174437（2026年）。[31] J.-R. Soh、F. de J uan、N. Qureshi、H. Jacobsen、H.-Y. Wang、Y.-F. Guo和A. T. Boothroyd，Mn3 101，140411（2020年）Ge的基态磁结构，《物理评论B》（R）。[32] H. Sim、J. Oh、J. Jeong、M. D. Le和J.-G. Park，六方$RMnO_3$：二维三角晶格反铁磁体的模型系统，《晶体学报B辑》72，3（2016年）。[33] I. Sosnowska、T. P. Neumaier和E. Steichele，铁酸铋中的螺旋磁有序，《物理学杂志C：固体物理》15，4835（1982年）。[34] M. Ramazanoglu、W. Ratcliff、Y. Choi、S. Lee、S.-W. Cheong和V. Kiryukhin，单晶$BiFeO_3$, 中磁序的温度依赖性质，《物理评论B》83，174434（2011年）。[35] J. Jensen和A. R. Mackintosh，《稀土磁性：结构与激发》（克拉伦登出版社，牛津，1991年）。[36] D. Gibbs、D. E. Moncton、K. L. D’Amico、J. Bohr和B. H. Grier，利用同步辐射研究钬的磁性X射线散射，《物理评论快报》55，234（1985年）。[37] N. F. Oliveira, Jr.、S. Foner、Y. Shapira和T. B. Reed，EuTe。I. 绝缘和导电单晶的磁行为，《物理评论B》5，2634（1972年）。[38] E. E. McCabe、C. Stock、E. E. Rodriguez、A. S. Wills、J. W. Taylor和J. S. O. Evans，Mott绝缘体$La_2O_2Fe_2OSe_2$, 中的弱自旋相互作用，《物理评论B》89，100402（2014年）。[39] W. R. Meier、Q.-P. Ding、A. Kreyssig、S. L. Bud’ko、A. Sapkota、K. Kothapalli、V. Borisov、R. Valentí、C. D. Batista、P. P. Orth、R. M. Fernandes、A. I. Goldman、Y. Furukawa、A. E. Böh mer和P. C. Canfield，空穴掺杂铁基超导体中稳定的刺猬型自旋涡旋晶体，《npj量子材料》3，5（2018年）。[40] H. Sagayama、D. Uematsu、T. Arima、K. Sugimoto、J. J. Ishikawa、E. O’Farrell和S. Nakatsuji，通过共振X射线衍射测定烧绿石铱氧化物$Eu_2Ir_2O_7$ 中Ir^{4+} 磁矩的长程全进全出有序，《物理评论B》87，100403(R)（2013年）。[41] H. Guo、C. Ritter和A. C. Komarek，直接测定$Nd_2Ir_2O_7$ 的自旋结构，借助中子衍射，《物理评论B》94，161102(R)（2016年）。[42] T. Inami、M. Nishiyama、S. Maegawa 和 Y. Oka，笼目晶格反铁磁体钾黄钾铁矾 KFe3 61, 12181 6 4 2, 2000 (OH) (SO) 的磁结构，《物理评论B》（）。[43] B. M. Bartlett 和 D. G. Nocera，采用氧化还原水热法制备的铁黄钾铁矾中的长程磁有序，《美国化学会志》127，8985（2005年）。[44] Y. Ishikawa、K. Tajima、D. Bloch 和 M. Roth，硅化锰 MnSi 中的螺旋自旋结构，《固体通讯》19，525（1976年）。[45] B. Lebech、J. Bernhard 和 T. Freltoft，通过小角中子散射研究立方 FeGe 的磁结构，《物理学杂志：凝聚态物质》1，6105（1989年）。[46] R. Laskowski、G. K. H. Madsen、P. Blaha 和 K. Schwarz，二氧化铀的磁结构和电场梯度：第一性原理研究，《物理评论B》69，140408 2004(R)（）。[47] J. Rossat-Mignod、P. Burlet、S. Quezel 和 O. Vogt，铈和铀单 pnictide 化合物中的磁有序，Physica B 102，237（1980年）。[48] E. F. Bertaut，磁结构的表示分析，《晶体学报A辑》24，217（1968年）。[49] A. B. Hellenes、T. Jungwirth、R. Jaeschke-Ubiergo、A. Chakraborty、J. Sinova 和 L. Šmejkal，P波磁体，arXiv:2309.01607（2023年）。[50] X.-J. Luo、J.-X. Hu、M.-L. Hu 和 K. T. Law，奇宇称磁体的自旋群对称性判据，arXiv:2510.05512。[51] Z. Song、Z. Qi、C. Fang、Z. Fang 和 H. Weng，通过自旋空间群对磁序进行统一对称性分类：共面偶波相的预测，《物理评论X》16，031038（2026年）。[52] 自旋空间群数据库现已发布于 https:// github.com/Peiyuan-Wang/SSG-database。

《自旋空间群与晶体磁序的分类》的补充材料

Zheng Zhang, [1] Peiyuan Wang, [2] 和 Y. X. Zhao[2], *[1] *Department of Physics, School of Science, Lanzhou University of Technology, Lanzhou 730050, China*
[2] *Department of Physics and HK Institute of Quantum Science & Technology, The University of Hong Kong, Pokfulam Road, Hong Kong, China*

目录

一、引言 3

二、非共面自旋空间群的枚举 5
A. 反幺正分级 5 B. 平移全纯与三种基本平移类型 5 C. 同态条件 6 D. 类型 0 7 E. 类型 1 8 1. 平移全纯 8 2. ρ 的分解与协变条件 8 3. 点群截面的受阻 1-余循环方程 9 4. 连续族与非公度磁序 9 5. 算法 10

F. 类型 2 10 1. 平移全纯 10 2. ρ 11的分解 3. ρ_T 与 S 11之间的协变条件 4. 点群截面的受阻 1-余循环方程 12 5. 算法 12 G. 等价关系 13

III. 共面和共线自旋空间群的枚举 13
A. 共面自旋空间群 1. 平移全 13
纯 2. 类型 0 3. 类型 1 4. 类型 14
2 B. 共线自旋空间群 14
14
15
17

IV. 枚举算法细节和自旋空间群名称 17

* yuxinphy@hku.hk

A. 枚举　　算法细节 18
1. 类型 0 的算法 2. 类型 18
1 的算法 3. 类型 2 的算法 18
4. 等价关系 B. 自旋空间群的 20
记法 20
22

V. 自旋空间群的层次分类 22

VI. 17种自旋晶格类型及其磁性序 25
A. 共线自旋-晶格类型 25 1. L.0.1：平移不变共线型 25 2. L.0.2：交错共线型 26

B. 共面自旋-晶格类型 1. P.0：平移不变共面 26
型 2. P.1.1：交错共面型 3. P.1.2：平面螺旋 26
4. P.2.1：反射交错共面型 5. P.2.2：双轴交 26
错共面型 26
27
27

C. 非共面自旋-晶格类型 1. N.0.1：平移不变非共面 27
型 2. N.0.2：交错非共面型 3. N.1.1：二分锥形 4. 28
N.1.2：圆锥螺旋 5. N.1.3：反射交错非共面型 6. 28
N.1.4：交替二分锥形型 7. N.1.5：反铁磁锥形螺旋 28
型 8. N.2.1：正交三重Q非共面型 9. N.2.2：倾斜双 28
重Q非共面型 10. N.2.3：交错正交三重Q非共面型 29
29
29
30
30
31

七. 中子衍射特征 31
A. 傅里叶分量与偏振 32 B. 与 Bertaut 表示分析的联系 34

八. 普适物理后果 35
A. 磁化强度的精确补偿 35 B. 非对易布里渊区的精确判据 36 C. 八极矩为零的 3Q 磁序 37 D. 17 种自旋晶格类型的动量空间自旋纹理 38

九. 与其他枚举框架的关系 41

十. 自旋空间数据库 41

XI. 总结与展望 43

参考文献 43

一、引言

弱自旋–轨道耦合（SOC）磁体中的晶体磁序对称性由自旋空间群（SSG） [1–5], 描述，正如非磁性晶体的对称性由空间群描述一样。近年来，人们已对所有母空间群 [3–5]的自旋空间群进行了数学枚举。然而，与空间群和晶体序的情况不同，自旋空间群与磁序之间的对应关系尚未建立。给定一个自旋空间群，目前尚不清楚它描述的是哪种磁序；反过来，给定一种磁序，通常必须在庞大的自旋空间群目录中进行搜索，才能确定其对称群。数学对象与物理现实之间的这一鸿沟限制了对称性方法的全部威力，也阻碍了非常规磁性的快速发展。

为了认识到这一不足，将自旋空间群与空间群进行比较很有启发性。空间群采用层次分类，既具有严格的数学基础，也具有明确的物理意义：晶系、布拉维晶格、几何类和算术类。分类的每个层级都对应晶体序的普适几何性质，而这一层次结构提供了一个框架，使我们能够依据对称性对晶体进行组织和理解。相比之下，现有的自旋空间群分类未能编码足够的物理信息。在最粗略的层级，自旋空间群依据其母空间群以及磁序的维数进行分类，这确实提供了基本的物理信息。然而，在下一层级，分类主要依据算法，而非物理性质。在 Chen 等人的 $t/k/g$ 分类中， [5], 自旋空间群根据母群中保留了哪些子群而分为 t型、 k型和 g型： t型保留平移子群并缩减点群， k型保留点群并缩减平移子群，而 g型则同时缩减两者。这种分类过于粗略，无法提供足够的物理洞见。在 Xiao 等人的 16 型分类中， [3], 自旋空间群根据从母空间群到 O(3)的同态所包含的不可约表示内容进行分类。这种分类更为复杂，但这些 SSG 类型如何对应磁序仍不清楚。

基于现有枚举算法的分类缺乏物理意义，这并不意味着算法必然与物理意义相悖；这只说明不恰当的算法才会如此。Chen 等人、Jiang 等人和 Xiao 等人的算法未能充分利用自旋空间群的群结构，因此依赖暴力枚举。枚举自旋空间群的核心任务是枚举不等价同态 $\varrho: G \to O(3)$，其中 G 是空间群。Chen 等人和 Jiang 等人采用的算法首先枚举给定母空间群 G的正规子群，然后对每个子群 L，将其作为 ϱ的核，即将 L 与平凡自旋操作关联起来。最后，算法枚举从 G/L 到 O(3)的单射同态，由此得到非平凡自旋操作。这种方法需要枚举大量正规子群。由于平移子群 T $\subset G$ 是无限群， G存在无穷多个正规子群。实际计算时，必须对 T 使用截断指标 i_k 。Chen 等人的工作中， [5] $i_k = 8$；而在 Jiang 等人的工作中， $i_k = 12$ [4]。截断导致枚举不完整。此外，这种方法无法纳入非公度磁序。在 Xiao 等人的分类中， [3], Hom(G, O(3))通过将 G 的不可约表示组合起来，构造 G的一个 O(3)表示来进行枚举。这种方法是完备的，因为它能够处理连续的自旋空间群族，从而纳入非公度磁序。然而，它也需要大量组合空间群的不可约表示，而且其物理意义尚未揭示。相比之下，Zassenhaus 算法 [6]枚举所有空间群，并自然地提供了空间群的分类

框架以及晶体序的分类。它之所以成功，在于充分利用了空间群的群结构。一般而言，空间群是 $\mathbb{Z}^3$ 与有限群 $P \subset O(3)$的扩张，

$$1 \to \mathbb{Z}^3 \to G \to P \to 1. \tag{1}$$

$\mathbb{Z}^3$ 在 $\mathbb{R}^3$ 中的嵌入定义了晶格群 T。晶格系由 $E^3 = \mathbb{R}^3 \rtimes O(3)$中 T 的正规化子$N(T)$决定，而布拉菲类型则进一步由 $N(T)$对 T 的作用决定。点群 P 是 $N(T)$的子群，它决定了几何类（Zassenhaus 算法中的$\mathbb{Q}$-类）；随后， P 对 T 的作用决定了算术类（Zassenhaus 算法中的$\mathbb{Z}$-类）。

受上述方法启发，我们也可以在自旋空间群的枚举中分别处理平移和点群元素。由此得到一种新的枚举算法，效率更高，也更符合物理实际。为枚举所有 $\varrho: G \to O(3)$，我们首先考察 ϱ 在平移子群上的限制，即同态 $\varrho_T : T \to O(3)$，称之为平移全纯。 ϱ 可分解为其 SO(3) 部分 $\rho: G \to SO(3)$和反幺正 $\mathbb{Z}_2$ 分级 χ，即 $\varrho = \chi\rho$。平移子群在 $SO(3)$中的像 $\rho_T(T)$仅有三种阿贝尔类：平凡群、 $SO(2)$和克莱因四元群 V_4。因此，我们可以根据 $\rho_T(T)$将自旋空间群分类为三种基本平移类型。对于每一种 $\rho_T(T)$类型，点群元素的自旋操作必须属于$SO(3)$中 $\rho_T(T)$的正规化子，这限制了可能的情况。当 $\rho_T(T)$为 $= SO(2)$或 V_4 时， ρ 可由传播波矢表征。平移与点群元素之间的协变条件对传播波矢施加了物理约束。最终，枚举可归结为枚举可能的波矢和点群的 1-余循环。在枚举的每个层次上，数学数据都承载着具体的物理信息，从而为自旋空间群提供了物理分类框架，使数量众多的自旋空间群变得易于理解。

作为一个基本步骤，我们根据平移全纯 ϱ_T 对自旋空间群进行分类。基于三种基本平移类型，我们进一步根据 $\varrho_T(T)$ 将自旋空间群分为 17 种平移类型，并称之为自旋晶格类型。每种自旋晶格类型对应一种磁序，并在中子衍射实验中呈现独特的布拉格峰和偏振。因此，我们的框架以直观清晰的方式连接了数学上的自旋空间群与磁序，使自旋空间群成为一种有望用于分析实验数据的实用对称性框架。我们讨论了现有磁序如何纳入我们的框架，并简要探讨了 Bertaut理论与我们框架之间的关系。

我们的分类框架立即导出若干普适物理后果，因为它提供了恰当的概念，用以表述自旋空间群和磁序的普适性质，而这些性质通常在以往的框架中隐而不显。我们给出四个例子：某些自旋晶格类型所强制的精确磁化补偿；非对易布里渊区的精确群论判据；一种八极矩消失的新型 3Q磁序；以及共面磁体中严格共线动量空间自旋纹理的对称性保护。

我们还讨论了本框架与以往框架之间的关系，尤其是 Xiao 等人的 16 型分类。我们提出了一种系统的方法，可将 Xiao 等人的自旋空间群映射到我们的分类框架。借此，我们揭示了 Xiao 等人表格中的一些隐藏规律。

本补充材料给出了快报中所呈现结果的完整推导。第 二节阐述反幺正分级和平移全纯群的框架，并将其应用于非共面自旋空间群的枚举。第 三 节将枚举扩展至共面和共线自旋空间群。第 四 节提供枚举的算法细节，并介绍自旋空间群命名所用的符号；第 五 节将分类组织为自旋空间群类的层级结构，从平移全纯群类型和自旋布拉维晶格类型，到自旋算术晶类和自旋晶类。第 六

节接着讨论17种普适自旋-晶格类型及其描述的磁序，第 七节推导其中子衍射特征及其与 Bertaut 表示分析的联系。第 八节推导普适物理后果，第 九 节阐述我们的分类与以往枚举框架之间的关系，第 十 节介绍自旋空间群数据库，第 十一节作总结。

II. 非共面自旋空间群的枚举

我们首先建立非共面自旋空间群的理论框架。共面和共线自旋空间群是非共面自旋空间群的退化情形，将在第III节中讨论。

A. 反幺正分级

非共面自旋构型不具有非平凡的纯自旋操作。因此，非共面自旋空间群 $\mathcal{G}$ 的一般元素可写成 $\{\varrho(g)|g\}$ 的形式，其中 g 作用于晶格，而 $\varrho(g) \in O(3)$ 作用于磁矩场。由于纯自旋操作是平凡的，$\mathcal{G} \cong G$，其中 G 是母空间群；因此，对于给定的 G，枚举所有不等价的非共面自旋空间群等价于分类所有不等价的同态 $\varrho: G \to O(3)$。

由于 $O(3) \cong SO(3)\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$，其中 $\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}} = \{E, \mathcal{P}\}$ 由自旋反演 $\mathcal{P} = \mathrm{diag}(-1, -1, -1)$ 生成，并通过时间反演操作 $\mathcal{T}$ 实现，每个 ϱ 都可分解为

$$\varrho(g) = \chi(g)\rho(g), \qquad \chi: G \to \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}, \qquad \rho: G \to SO(3). \tag{2}$$

这里，χ 是一个 $\mathbb{Z}_2$ 分级，用于指定 g的幺正或反幺正特征，而 ρ 是一个普通同态。相应地，同态集合可分解为

$$\mathrm{Hom}\big(G, O(3)\big) \simeq \mathrm{Hom}\big(G, SO(3)\big) \times \mathrm{Hom}\big(G, \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}\big), \tag{3}$$

因此，分级和 $SO(3)$部分可以分别枚举，然后再组合起来。不等价的分级 χ 由 $H^1(G, \mathbb{Z}_2)$分类，对应于以 Opechowski-Guccione（OG）母空间群 G为母群的 I、III 和 IV 型磁空间群 [7]。[1] 不过这里要指出，$H^1(G, \mathbb{Z}_2)$与 I、III、IV 型磁群之间的映射是多对一的，因为磁群的分类还考虑了额外的等价关系。在得到整个 $\mathrm{Hom}(G, O(3))$之前，我们在枚举 $\mathbb{Z}_2$ 分级时不考虑这些额外的等价关系。

通过枚举G 中序为 $|G|/2$的所有不等价正规子群，可以完成 G 的 $\mathbb{Z}_2$ 分级枚举。这样，问题就归结为枚举 $\mathrm{Hom}(G, SO(3))$。

B. 全纯群与三种基本平移类型

该空间 群 G 是点群 P 由阿贝尔平移子群 T 扩张而成的群 ，

$$1 \to \mathrm{T} \to G \to P \to 1. \tag{4}$$

[1] 类型 I、III、IV 磁群的 OG母群 G只需忽略 M的反幺正分级即可得到。对于类型 I、III 磁群，OG母群与 BNS母群相同；而对于 IV 型磁群，OG 母群则不同于 BNS 母群。 M

将 ϱ 限制在 T 上定义了平移全纯 $\varrho_T \equiv \varrho|_{\mathrm{T}}$：T $\to O(3)$，其 $SO(3)$ 部分记为$\rho_T \equiv \rho|_{\mathrm{T}}$；分级的限制为 $\chi_T \equiv \chi|_{\mathrm{T}}$，因此有 $\varrho_T = \chi_T \rho_T$。由于 T 是阿贝尔群，其像$\rho_T$(T) 必须是 $SO(3)$ 的阿贝尔子群。在整体 $SO(3)$ 共轭意义下， $SO(3)$ 的阿贝尔子群恰好分为三类:

类型 0（平凡）： $\rho_T(\mathrm{T}) = \{E\}$。
Ty类型 1（单轴）： $SO(2)_{\boldsymbol{n}}$ 的子群，由绕固定轴 $\boldsymbol{n}$ 旋转生成。
类型 2（双轴）： 克莱因四元群 $V_4 = \{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}$。

这三类具有定性上不同的结构，并将自旋空间群分类为三种基本的平移类型，我们也称之为类型 0、类型 1 和类型 2。

由于 T 在 G 中是正规子群，像 ρ_T(T) 在 $\rho(G)$ 中也是正规子群，因此 $\rho(G) \subseteq N_{SO(3)}(\rho_T(\mathrm{T}))$，其中 $N_{SO(3)}(\rho_T(\mathrm{T}))$ 是 ρ_T(T) 在 $SO(3)$ [2] 中的正规化子。定义 $\rho_P(P) \cong \rho(G)/\rho_T(\mathrm{T})$，可得 $\rho_P(P) \subseteq N_{SO(3)}(\rho_T(\mathrm{T}))/\rho_T(\mathrm{T})$。这一包含关系严格限制了可能的点群部分。三种平移类型对应的正规化子和商群汇总于表 I，其结构由以下交换图概括

$$\begin{array}{ccccccccc} 1 & \longrightarrow & \mathrm{T} & \longrightarrow & G & \longrightarrow & P & \longrightarrow & 1 \\ & & \downarrow{\scriptstyle \rho_{\mathrm{T}}} & & \downarrow{\scriptstyle \rho} & & \downarrow{\scriptstyle \rho_P} & & \\ 1 & \longrightarrow & \rho_{\mathrm{T}}(\mathrm{T}) & \longrightarrow & \rho(G) & \longrightarrow & \rho_P(P) & \longrightarrow & 1 \end{array}$$

其中 两行分别是空间群及其自旋像在 $SO(3$ 中的群扩张).

这里需要指出，对于类型 1， $SO(2)_{\boldsymbol{n}}$ 的子群可以是有限群 C_n ，也可以是稠密于 $SO(2)$ 中的无限子群。前者和后者分别对应公度磁序和非公度磁序。

表 I。三种基本平移类型的平移全纯，以及其在 $SO(3$ 中的正规化子和承载点群部分的商群。这里 $\boldsymbol{m} \perp \boldsymbol{n}$。对于类型 1，商群针对公度$\boldsymbol{k}$书写，其中 ρ_T(T) $\cong C_n$；对于非公度 $\boldsymbol{k}$ ，像在 $SO(2)_{\boldsymbol{n}}$ 中稠密，商群是非豪斯多夫的，但我们的构造不需要使用它。

Type	ρ_T(T)	$N_{SO(3)}\big(\rho_T(\mathrm{T})\big)$	N/ρ_T(T)
类型 0（平凡）	$\{E\}$	$SO(3)$	$SO(3)$
类型 1（单轴）	$C_n \subset SO(2)_{\boldsymbol{n}}$	$SO(2)_{\boldsymbol{n}} \rtimes \{E, R_{\boldsymbol{m}}(\pi)\}$	$SO(2) \rtimes C_2$
类型 2（双轴）	V_4	O	S_3

C. 同态条件

G 中的任意元素都可分解为 $g = t\, s(p)$，其中 $t \in$ T 是纯平移，而 $s(p) = \{R_p|\boldsymbol{\tau}_p\}$是点群操作 $p \in P$ 在 G中的一个选定截面，其中 $\boldsymbol{\tau}_p$ 是分数平移。该

[2] 对于 G 的子群 H， G 中 H 的正规化子定义为 $N_G(H) := \{g | ghg^{-1} \in H$，其中 $\forall\, h \in H\}$.

ho态射条件 $\rho(g_1)\rho(g_2) = \rho(g_1 g_2)$ 因而等价于以下三个条件

$$\rho_T(\boldsymbol{t}_1)\rho_T(\boldsymbol{t}_2) = \rho_T(\boldsymbol{t}_1 + \boldsymbol{t}_2), \quad \forall\, \boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2 \in L, \tag{5}$$

$$\rho(s(p))\rho_T(\boldsymbol{t})\rho(s(p))^{-1} = \rho_T(R_p \boldsymbol{t}), \quad \forall\, p \in P,\ \boldsymbol{t} \in L, \tag{6}$$

$$\rho(s(p_1))\rho(s(p_2)) = \rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})\rho(s(p_1 p_2)), \quad \forall\, p_1, p_2 \in P, \tag{7}$$

其中 L 是与 T 相关联的布拉菲格子， R_p 是作用于 $\mathbb{R}^3$上的 p 的旋转部分，an d

$$\boldsymbol{t}_{p_1,p_2} = \boldsymbol{\tau}_{p_1} + R_{p_1}\boldsymbol{\tau}_{p_2} - \boldsymbol{\tau}_{p_1 p_2} \tag{8}$$

是所选截面的二余循环，定义为 $s(p_1)s(p_2) = t_{p_1,\ p_2}\, s(p_1 p_2)$。

这三个条件各有不同的含义。方程（5）表示 ρ_T 是一个同态，并且结合 T 的阿贝尔性，将其像限制在上述三类之中。方程（6）指出 ρ_T在点群操作下具有协变性；如第 IIE 节和II F节所示，它将成为关于传播波矢的条件。方程（7）是关于点群截面的受阻一余循环方程，并在 $\rho(s(p))$ 确定后，控制其剩余自由度。 ρ_T 已固定。

确定这三种平移类型后，我们现在逐一枚举同态 ρ: $G \to SO(3)$ 的各类型。将结果与反幺正分级 χ 结合，即可得到母空间群为 G的所有非共面自旋空间群。

D. 类型 0

根据定义，0型自旋空间群具有 ρ_T(T) $= \{E\}$。正规化子为 $N_{SO(3)}(\{E\}) = SO(3)$，而 $\rho(G)$ 是有限点群 P 的像，因此是 $SO(3)$ 的有限子群。同态 ρ 因此由其点群部分决定：选择提升 $\rho(t\, s(p)) = \rho_P(p)$，得到

$$\mathrm{Hom}(G, SO(3))\big|_{\rho_T=1} \cong \mathrm{Hom}(P, SO(3)). \tag{9}$$

结合 $\mathbb{Z}_2$ 分级，类型 0 非共面自旋空间群可按以下方式分类

$$\mathrm{Hom}(G, O(3))|_{\rho_T=1} \simeq \mathrm{Hom}(P, SO(3)) \times \mathrm{Hom}(G, \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}) \tag{10}$$

当 χ_T 平凡时，即 $\varrho_T = 1$，分类简化为

$$\mathrm{Hom}(G, O(3))|_{\varrho_T=1} \simeq \mathrm{Hom}(P, SO(3)) \times \mathrm{Hom}(P, \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}) \cong \mathrm{Hom}(P, O(3)), \tag{11}$$

这对应于与 P 相关的自旋点群分类。

为枚举所有不等价的 ρ_P，我们采用 Litvin [1, 2] 的方法。我们固定一个正规子群 $H \triangleleft P$，并令 $\ker \rho_P = H$，使得每个 $h \in H$ 都在自旋空间上平凡作用。根据同态基本定理，

$$\rho_P(P) \cong P/\ker \rho_P = P/H. \tag{12}$$

因此，商群 P/H 必定与 $SO(3)$ 的某个有限子群抽象同构。对于 $S_i \subset SO(3)$ 中每个与 P/H 抽象同构的子群共轭类，所有同构 $P/H \to S_i$ 都通过 S_i 的自同构相关联，因此定义了同一个自旋点群。枚举过程如下：

(i) 枚举 P 的所有正规子群 H；(ii) 对每个 H，枚举 $S_i \subset SO(3)$ 中与 P/H 抽象同构的子群共轭类；(iii) 对每个 $S_i \cong P/H$，选取一个同构 $P/H \to S_i$；(iv) 将此同构提升为同态 $\rho_P : P \to SO(3)$；(v) 合并等价的同态。将所得的 ρ_P 与分级 χ 结合，即可得到母空间群为 G 的所有 0型自旋空间群。

E. 类型 1

1. *Translation holonomy*

对于 1型自旋空间群，像 $\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_{\boldsymbol{n}}$ 是非平凡的，由绕公共轴 $\boldsymbol{n}$ 的旋转构成。不失一般性，我们选择 $\boldsymbol{n} = \hat{z}$，并写作

$$\rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i\theta(\boldsymbol{t})J_z}, \tag{13}$$

其中 J_z 是 $SO(2)_z$ 的生成元。同态条件 (5) 要求

$$\theta(\boldsymbol{t}_1) + \theta(\boldsymbol{t}_2) = \theta(\boldsymbol{t}_1 + \boldsymbol{t}_2) \pmod{2\pi}, \qquad \forall\, \boldsymbol{t}_1, \boldsymbol{t}_2 \in L. \tag{14}$$

因此，对于常向量 $\boldsymbol{k}$，有 $\theta(\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}$。由于 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k} + \boldsymbol{K}$ 在 $\boldsymbol{K} \in L$ 时定义相同的 ρ_T，我们可以将 $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^3/\widehat{L}$ 限定在第一布里渊区内。因此

$$\rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}, \tag{15}$$

因此，ρ_T 由轴 $\boldsymbol{n}$ 和传播波矢 $\boldsymbol{k}$确定。$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$ 不予考虑，因为它可化为类型 0。

2. *Decomposition of ρ and the covariant condition*

在 $SO(3)$ 中，$\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_z$ 的正规化子为

$$N_{SO(3)}\big(\rho_T(\mathrm{T})\big) = SO(2)_z \rtimes \{E, R_x(\pi)\} \cong SO(2) \rtimes C_2. \tag{16}$$

对于公度的 $\boldsymbol{k}$（即以倒易基底为单位的 $\boldsymbol{k} \in \mathbb{Q}^3$），$\rho_T(\mathrm{T})$ 是一个有限循环群 C_n。由于 $\rho(G) \subset N_{SO(3)}(\rho_T(\mathrm{T}))$，点群截面的自旋操作具有如下形式

$$\rho(s(p)) = e^{-i\theta(s(p))J_z}\,[R_x(\pi)]^{(1-\eta_p)/2}, \tag{17}$$

其中 $\eta : P \to \{\pm 1\}$ 是一个同态：$\eta_p = 1$ (-1) 表示 p 保持（反转）z 轴的取向。

将式（17）代入协变条件（6）得到

$$e^{-i\eta_p(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z} = e^{-i(R_p^{-1}\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}, \tag{18}$$

这要求

$$R_p\boldsymbol{k} = \eta_p\boldsymbol{k} \pmod{\widehat{L}}, \qquad \forall\, p \in P. \tag{19}$$

我们将式（19）称为平移全纯的协变条件。它约束传播波矢：除一个倒格矢外，每个点群操作都必须保持 $\boldsymbol{k}$不变或将其反向，因此 $\boldsymbol{k}$必须位于一个高对称点、线或平面上，在该处所有 R_p 都以 ±1的方式作用。

$\boldsymbol{k}$有两种不同的类型。(i) 当 $\boldsymbol{k}$ 是时间反演不变动量（TRIM）时，$\boldsymbol{k} \equiv -\boldsymbol{k}$（模 L），因此 $\eta_p = 1$ 和 $\eta_p = -1$ 没有区别。如果存在满足 $R_p\boldsymbol{k} = \boldsymbol{k}$（模 L）的 TRIM $\boldsymbol{k}$，那么所有 $\eta \in \mathrm{Hom}(P, \mathbb{Z}_2)$ 都是允许的。(ii) 当 $\boldsymbol{k}$ 是非时间反演不变点时，对于每个允许的 $\boldsymbol{k}$，η 都被唯一确定。

在枚举中，我们首先固定 η，然后枚举满足方程（19）的允许 $\boldsymbol{k}$。

3. *Obstructed 1-cocycle equation of point-group sections*

将方程（17）代入方程（7）得到

$$\theta(s(p_1)) + \eta_{p_1}\theta(s(p_2)) = \boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2} + \theta(s(p_1p_2)) \pmod{2\pi}. \tag{20}$$

因此，$\theta(s(p))$ 定义了 P的一个具有因子系 $\nu_{\boldsymbol{k}}(p_1, p_2) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}}$ 且分级为 η [3]的一维余表示。我们将方程（20）称为点群截面的受阻 *1*-余循环方程。仅当障碍 $[\nu_{\boldsymbol{k}}] \in H^{2,\eta}(P, U(1))$ 是平凡的，方程才有解；该条件对允许的波矢施加了额外的选择规则。当 $[\nu_{\boldsymbol{k}}] = 1$时，不等价解 θ由 $H^{1,\eta}(P, U(1))$ 分类，即 P 的一维余表示。

两点说明了如何使用这一结果。改变截面 $s(p)$ 只会使 $\nu_{\boldsymbol{k}}$ 改变一个余边界，并不会产生不等价的 ρ。通过 $R_x(\pi)$ 进行全局 $SO(3)$ 共轭会将 $\boldsymbol{k} \to -\boldsymbol{k}$ 和$\theta \to -\theta$ 映射为相应对象，同时保持 η不变，因此 $(\boldsymbol{k}, \theta)$ 和 $(-\boldsymbol{k}, -\theta)$ 描述的是等价的自旋空间群；因此我们要对此 $\mathbb{Z}_2$取商。

汇总这些结果，母空间群为 G 的 1 型自旋空间群的 $SO(3)$ 部分可分类为

$$\bigcup_{\eta\in\mathrm{Hom}(P,\mathbb{Z}_2)} \bigcup_{\boldsymbol{k}\in\mathcal{W}_\eta} H^{1,\eta}(P, U(1)) \Big/ \mathbb{Z}_2, \tag{21}$$

其中

$$\mathcal{W}_\eta = \left\{ \boldsymbol{k} \neq \boldsymbol{0} \;\middle|\; R_p\boldsymbol{k} = \eta_p\boldsymbol{k} \pmod{\widehat{L}}\ \forall p \in P,\ [\nu_{\boldsymbol{k}}] = 1 \right\}, \tag{22}$$

且 $\mathbb{Z}_2$ 的作用为 $(\boldsymbol{k}, \theta) \mapsto (-\boldsymbol{k}, -\theta)$。

需要注意的是，空间群 G的非对称型性只体现为 2-余循环障碍 $\nu_{\boldsymbol{k}}$。一旦 $[\nu_{\boldsymbol{k}}] = 1$，在此 $\boldsymbol{k}$ 下，G 的自旋空间群分类就与其对应的对称空间群的分类相同。方程式（20）的所有解都可以通过将 $\theta(s(p_1)) + \eta_{p_1}\theta(s(p_2)) = \theta(s(p_1p_2))$（模 2π）与方程式（20）的一个特殊解相乘而得到。

4. *Continuous families and incommensurate orders*

不等价的类型 1 同态的数量可能是无限的，因为 $\boldsymbol{k}$ 连续变化。在某些情况下，允许的 $\boldsymbol{k}$ 构成一条直线或一个面，从而形成类型 1 自旋空间群的连续族。

---

[3] 定义 $C'(p) = e^{-i\theta(s(p))\mathcal{K}(\eta_p-1)/2}$，我们有 $C'(p_1)C'(p_2) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}}C'(p_1p_2)$。因此，$C'$ 是 P的一个一维余表示，其因子系为 $\nu_{\boldsymbol{k}}(p_1, p_2) = e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}}$。

我们的方法将 $\boldsymbol{k}$ 保留为参数，因此这类族以一个族名标记，并通过 $\boldsymbol{k}$的取值加以区分。如果 $\boldsymbol{k}\in\mathbb{Q}^3$，则磁序是公度的；而如果 $\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3\backslash\mathbb{Q}^3$，则是非公度的。只有类型 1 自旋空间群能够描述非公度磁序；母群 G 只有在存在高对称线或面，且在其上对于某个 η有 $\eta_p R_p\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}$ 时，才能支持这类磁序。

5. *Algorithm*

枚举母空间群 G 的 1型自旋空间群的步骤如下：

(i) 枚举所有指数为二的正规子群 $P_0\triangleleft P$；每个子群对应一个 $\mathbb{Z}_2$ 分级 η：$P\to\{\pm1\}$。还必须包含平凡分级；

(ii) 对每个 η，确定所有满足协变条件的波矢，$\eta_pR_p\boldsymbol{k}=\boldsymbol{k}$(模 L)；随后平移全纯为 $\rho_T(\boldsymbol{t})=e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$；

(iii) 对每个 $\boldsymbol{k}$，检查 $[\nu_{\boldsymbol{k}}]=1$ 并枚举 P 的因子系为 $\nu_{\boldsymbol{k}}$ 且分级为 η的不等价一维射影余表示。每个这样的余表示都根据方程（17）确定一个 $\rho(s(p))$。然后 $\rho(g)=\rho(ts(p))=\rho_T(\boldsymbol{t})\rho(s(p))$。

(iv) 合并等价的同态 ρ；(v) 组合 th

所得的 ρ 连同分级 χ，可得到所有母空间群为.....的类型 1 自旋空间群 G.

F. 类型 2

1. *Translation holonomy*

对于类型 2 自旋空间群，平移子群的像为 ρ_T(T) $\cong V_4$。不失一般性，我们取

$$V_4=\{E,R_x(\pi),R_y(\pi),R_z(\pi)\}\cong D_2. \tag{23}$$

由于 V_4的指数为二，子群 2T $=\{\boldsymbol{t}^2\,|\,\boldsymbol{t}\in\mathrm{T}\}$包含于 ρ_T的核中，因为 $\rho_T(\boldsymbol{t}^2)=\rho_T(\boldsymbol{t})^2=E$。因此，$\rho_T$可通过 T/2T $\cong\mathbb{Z}_2^3$ 分解，并可写为

$$\rho_T(\boldsymbol{t})=\begin{pmatrix}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}}&0&0\\0&e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}}&0\\0&0&e^{i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}}\end{pmatrix},\qquad\forall\,\boldsymbol{t}\in L, \tag{24}$$

其中 $\boldsymbol{k}_i$ 为时间反演不变动量。将原始倒格矢记为 $\boldsymbol{b}_j$，则时间反演不变动量具有如下形式

$$\boldsymbol{k}_i=\tfrac{1}{2}\big(n_{i1}\boldsymbol{b}_1+n_{i2}\boldsymbol{b}_2+n_{i3}\boldsymbol{b}_3\big),\qquad n_{ij}\in\{0,1\}. \tag{25}$$

ρ_T的像为 V_4，当且仅当对于某个非零的 $\boldsymbol{t}_0\in$，有 ker $\rho_T=\langle 2\mathrm{T}\ \boldsymbol{t}_0\rangle$；等价地，当且仅当这三个波矢互不相同、均非零，并满足

$$\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3=\boldsymbol{0}\pmod{\widehat{L}}. \tag{26}$$

因此，这三个 $\boldsymbol{k}_i$ 恰好是 $\boldsymbol{t}_0$ 在 TRIM 群中的湮没子的非零元素，即，

$$\boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{t}_0=0\pmod{2\pi},\qquad i=1,2,3. \tag{27}$$

因此 ρ_T 由 $\boldsymbol{t}_0$确定，而三元组 $\{\boldsymbol{k}_i\}$可由式（27）恢复。

由于 ρ_T(T) 是 $\rho(G)$ 的正规子群， ρ_T 的核在 G 中是正规的；因此 $\boldsymbol{t}_0$ 必须在点群作用下保持不变，

$$R_p\boldsymbol{t}_0 = \boldsymbol{t}_0 \pmod{2L}, \qquad \forall\, p \in P. \tag{28}$$

这类 $\boldsymbol{t}_0$ 有三种:

(1) $\boldsymbol{t}_0 = \boldsymbol{a}_i$、 $i = 1$，2，3，其中 $\boldsymbol{a}_i$ 是一个原始基矢。在这一类中，两个原始平移分别映射为两个正交的 π 旋转，而第三个在自旋空间中起平凡作用。有三个不等价的 $\boldsymbol{t}_0$。对于固定的 $\boldsymbol{t}_0$，不同的 ρ_T 选择彼此等价，因此我们可以设定一个 $\boldsymbol{k}_i$ 的规范选择。

(2) $\boldsymbol{t}_0 = \boldsymbol{a}_i + \boldsymbol{a}_j$ 与 $i \neq j$。在这一类中，两个原始平移映射为同一个 π 旋转，第三个则映射为另一个。有三个不等价的 $\boldsymbol{t}_0$。对于固定的 $\boldsymbol{t}_0$，不同的 ρ_T 选择彼此等价，因此我们可以设定一个 $\boldsymbol{k}_i$ 的规范选择。

(3) $\boldsymbol{t}_0 = \boldsymbol{a}_1 + \boldsymbol{a}_2 + \boldsymbol{a}_3$。在这一类中，三个原始平移分别映射为三个正交的 π 旋转。 $\boldsymbol{t}_0$ 有一个等价类。不同的 ρ_T 选择彼此等价，因此我们可以设定一个 $\boldsymbol{k}_i$ 的规范选择。

如果三个晶格方向彼此不等价，则得到 $3+3+1=7$ 个不等价同态 ρ_T；如果某些方向等价，数量则相应减少。

2. *Decomposition of* ρ

在 $SO(3)$ 中， V_4 的正规化子是手性八面体群，

$$N_{SO(3)}(V_4) = O, \tag{29}$$

因此 $\rho(G) \subset O$。商群 $N(V_4)/V_4 = O/V_4 \cong S_3$ 是三个正交自旋轴的置换群。因此，对于每个 $g \in G$，

$$\rho(g) = D(g)S(p), \qquad D(g) \in V_4, \quad S(p) \in S_3, \tag{30}$$

其中 $S:\ P \to S_3$ 是由 $\mathrm{Hom}(P, S_3)$ 分类的同态。由于 $\rho(g) = \rho_T(\boldsymbol{t})\rho(s(p))$ 且 $\rho_T(\boldsymbol{t}) \in V_4$，因子 $\rho_T(\boldsymbol{t})$ 可以并入 $D(g)$，后者于是满足

$$D(g_1)\pi_{p_1}\big(D(g_2)\big) = D(g_1g_2), \qquad \forall\, g_1, g_2 \in G, \tag{31}$$

其中对于 $d \in V_4$，有 $\pi_p(d) = S(p)\, d\, S(p)^{-1}$。也就是说， $D:\ G \to V_4$ 是一个 π-扭曲同态，由$H^{1,\pi}(G, V_4)$ 分类。

3. *Covariant condition between* ρ_T *and* S

协变条件（6）要求

$$\pi_p\big(\rho_T(\boldsymbol{t})\big) = \rho_T(R_p\boldsymbol{t}). \tag{32}$$

由于 S_3 置换了 x、 y、 z 轴，因此它也以相同方式置换 ρ_T 的三个对角元素以及波矢 $\boldsymbol{k}_1$、 $\boldsymbol{k}_2$、 $\boldsymbol{k}_3$。记 $S(p)$ 对应的置换为 $\sigma_p \in S_3$，

我们得到

$$\boldsymbol{k}_{\sigma_p^{-1}(i)} = R_p^{-1}\boldsymbol{k}_i \pmod{\widehat{L}}, \qquad i=1,2,3, \tag{33}$$

或者等价地

$$R_p\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_{\sigma_p(i)} \pmod{\widehat{L}}, \qquad i=1,2,3. \tag{34}$$

这是类型 2 的协变条件：点群操作必须置换这三个波矢。如果某个 34 的等式对 $p \in P$ 不成立，则三元组 $\{\boldsymbol{k}_i\}$ 不被允许；如果成立， $S(p)$ 就是实现 σ_p 的置换矩阵。

由于三元组 $\{\boldsymbol{k}_i\}$由 $\boldsymbol{t}_0$确定，协变条件可以改写为 $\boldsymbol{t}_0$ 的不变性，即式（28）。这是实际进行枚举的方法：首先确定所有不变的 $\boldsymbol{t}_0$ ，然后读出相应的 $\boldsymbol{k}_i$； $S(p)$ 随后由式（34）确定。这也导出了母空间群的选择规则：仅当 T/2T 包含一个在模 P 下关于 $2L$ 不变的非零元素时，才存在类型 2 自旋空间群。

4. Obstructed 1-cocycle equation of point-group sections

给定 ρ_T 和 S，式（7）变为

$$D(s(p_1))\,\pi_{p_1}\big[D(s(p_2))\big] = \rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})\,D(s(p_1p_2)), \qquad \forall\, p_1,p_2 \in P. \tag{35}$$

写作

$$D(s(p)) = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1^s(p)} & 0 & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2^s(p)} & 0 \\ 0 & 0 & e^{i\theta_3^s(p)} \end{pmatrix}, \qquad \theta_i^s(p) \in \{0,\pi\}, \tag{36}$$

条件 $\det D(s(p)) = 1$ 要求

$$\theta_1^s(p) + \theta_2^s(p) + \theta_3^s(p) = 0 \pmod{2\pi}. \tag{37}$$

方程（35）于是化简为

$$\theta_i^s(p_1) + \theta^s_{\sigma_{p_1}^{-1}(i)}(p_2) = \boldsymbol{k}_i\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2} + \theta_i^s(p_1p_2) \pmod{2\pi}, \qquad i=1,2,3. \tag{38}$$

在约束（38）下求解方程（37），可得所有可能的 θ^s ，从而得到所有 π-扭曲同态D： $G \to V_4$。仅当障碍 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2}) \in H^{2,\,\pi}(P,\ V_4)$ 平凡时，解才存在；此时，不等价的解 $D(s(p))$ 由 $H^{1,\,\pi}(P,\ V_4)$ 分类。这里，空间群 G 的非对称型性仅体现为障碍 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2})$；当它在 $\boldsymbol{k}$ 处平凡时，分类与对称型情形相同。

最后，结合分级 χ，即可完成对类型 2 非共面自旋空间群的枚举。

5. Algorithm

对于给定的母空间群 G，所有类型 2 自旋空间群的枚举如下：

(i) 确定所有在 P 模 $2L$ 下不变的非零 $\boldsymbol{t}_0 \in$T/2T（见上文的选择规则）；对于每个允许的 $\boldsymbol{t}_0$，由湮灭子三元组 $\{\boldsymbol{k}_i\}$ 构造 ρ_T；(ii) 对于每个 ρ_T，确定 σ：从 $R_p\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_{\sigma_p(i)}$ 得到 $P \to S_3$，并构造相应的矩阵 $S(p)$；(iii) 在约束条件 (37) 下求解方程 (38)，得到所有允许的 θ_i^s，构造 $D(s(p))$，进而得到 $\rho(g) = \rho_T(\boldsymbol{t})D(s(p))S(p)$；(iv) 合并等价的同态 ρ；(v) 将所有不等价的 ρ 与分级 χ 结合，得到所有母空间群为 G 的类型 2 自旋空间群。

G. 等价关系

必须区分三种等价关系。

(1) $SO(3)$ 共轭。如果对于所有满足 $O \in SO(3)$ 的 $g \in G$，都有 $\rho_1(g) = O\rho_2(g)O^{-1}$，则这两个同态等价。这种等价已纳入枚举：对于类型 1，我们选取旋转轴作为 z 轴，并合并具有 $\boldsymbol{k}$ 和 $-\boldsymbol{k}$ 的情况。对于类型 2，我们令 $V_4 = \{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}$，并对 $\boldsymbol{k}_i$ 作规范选择。

(2) 的自同构 G。如果存在 G 的一个自同构 α，使得 $\varrho_1 = \varrho_2 \circ \alpha$，则两个同态 ϱ_1、$\varrho_2 : G \to O(3)$ 等价。我们遵循物理惯例，要求 α 必须保持 G 的手性。这种等价并未纳入算法，必须在枚举后施加；它将描述同一磁序但处于不同设定下的自旋空间群识别为等价。

（3）连续族。对于 1型自旋空间群，彼此连续连接且具有相同 η 的波矢属于同一族。这里我们遵循 Xiao 等人 [3]的约定：该族使用一个标记，而 $\boldsymbol{k}$ 作为参数。

III. 共面和共线自旋空间群的枚举

共面和共线自旋空间群是非共面自旋空间群的退化情形。在这两种情况下，磁矩在非平凡的纯自旋群 $\mathcal{S}$ 作用下保持不变，因此该自旋空间群是由一个空间群对 $\mathcal{S}$ 的扩张，枚举归结为到 $O(2)$ 或 $O(1)$ 中的同态。

A. 共面自旋空间群

当磁矩被限制在一个平面内时，我们将该平面取为 xy 平面，纯自旋子群为

$$\mathcal{S} = \{E, \mathcal{P}R_z(\pi)\}, \qquad \mathcal{P} = \mathrm{diag}(-1,-1,-1), \tag{39}$$

其中，$\mathcal{P}R_z(\pi) = \mathrm{diag}(1,1,-1)$表示将磁矩关于该平面反射。商群 $\mathcal{G}/\mathcal{S} \cong G$ 与一个空间群同构。$g \in G$ 的自旋操作通过将一个取值于 $O(2)$ 的同态 $\rho : G \to O(2)$嵌入 $O(3)$而得到：

$$\rho(g) \ \longmapsto\ \mathrm{diag}\big(\rho(g), \det\rho(g)\big). \tag{40}$$

公式（40）将 O（2）映射到 SO（3），并保证纯自旋元素（39）得到保持。因此，共面自旋空间群由不等价同态 ρ： $G \to O$（2） $\subset SO$（3）进行分类。

由于纯自旋群固定平面的法向方向，当它们的 O（2）值同态在 O（2）中通过共轭相互关联时，两个共面自旋空间群是等价的；交换法向轴与面内轴的置换会改变纯自旋群，因此不构成共面自旋空间群之间的等价关系。该约定由标准形式（40）所蕴含，并将在本节中始终采用。

1. *Translation holonomy*

像 $\rho_T(\mathrm{T}) \subset O(2)$ 是阿贝尔群，并且在 $O(2)$ 中经过共轭后，属于与非共面情形相同的三类：

类型 0： $\rho_T(\mathrm{T}) = \{E\}$。
类型 1： $\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_z$ 是非平凡的，其中 $\rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$。
类型 2： $\rho_T(\mathrm{T}) \cong V_4 = \{E, -1, \sigma, -\sigma\}$ 或 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong D_1 = \{E, \sigma\}$，其中 $-1 = \mathrm{diag}(-1,-1)$、 $\sigma = \mathrm{diag}(1,-1)$，以及 $-\sigma = \mathrm{diag}(-1,1)$。在嵌入 (40) 下， V_4 变为 $\{E, R_z(\pi)\ R_x(\pi)\ R_y(\pi)\}$，而 D_1 变为 $\{E, R_x(\pi)\}$。
这再次为共面自旋空间群给出了三种基本平移类型。

2. *Type 0*

对于类型 0 的共面自旋空间群， ρ_T 是平凡的，而 ρ 由 ρ_P 确定： $P \to O(2)$。由于 $O(2) = SO(2) \rtimes \{E, \sigma\}$，我们将其分解为

$$\rho_P(p) = C(p)\,\sigma^{(1-\eta_p)/2}, \qquad C(p) \in SO(2), \quad \eta_p = \pm 1. \tag{41}$$

这里， $\eta : P \to \mathbb{Z}_2$ 是一个同态，而 $C : P \to SO(2)$是一个 η扭曲同态。记作$C(p) = e^{-i\theta(p)J_z}$，每个 C 都对应于一个一维余表示 $C'(p) = e^{-i\theta(p)}\mathcal{K}^{(1-\eta_p)/2}$，它属于$P$ 且其分级为 η。因此

$$\mathrm{Hom}\big(P, O(2)\big) = \bigcup_{\eta \in \mathrm{Hom}(P,\mathbb{Z}_2)} H^{1,\eta}\big(P, U(1)\big). \tag{42}$$

分级 η 的分类对应于母点群为 P的 III 型磁点群的分类，而 $H^{1,\eta}(P, U(1))$对应于磁点群 P_η的一维不可约余表示。因此，类型 0 的共面自旋空间群与共面自旋点群一一对应。

3. *Type 1*

对于类型 1 共面 自旋空间群， $\rho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_z$，而且在 $O(2)$ 中的正规化子就是其自身 $O(2)$。我们将其分解 se

$$\rho(g) = C(g)\,\sigma^{(1-\eta_p)/2}, \qquad C(g) \in SO(2), \quad \eta_p = \pm 1, \tag{43}$$

其中再次有 $\eta : P \to \mathbb{Z}_2$ 是一个同态，且 $C : G \to SO(2)$ 是 η-扭曲的。平移全纯为

$$\rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}, \qquad \forall\, \boldsymbol{t} \in \mathrm{T}, \tag{44}$$

其中 $\boldsymbol{k}\neq\mathbf{0}$ a wa 布里渊区中的矢量。ρ_T 与 $\rho(s(p))$ 之间的协变条件读作 s

$$R_p\boldsymbol{k}=\eta_p\boldsymbol{k}\pmod{\widehat{L}},\tag{45}$$

从而，对于给定的分级 η，式（45）确定所有允许的波矢。

对于固定的 ρ_T，条件（7）要求

$$\theta(s(p_1))+\eta_{p_1}\theta(s(p_2))=\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}+\theta(s(p_1p_2))\pmod{2\pi}.\tag{46}$$

定义 $C'_s(p)=e^{-i\theta(s(p))}\mathcal{K}^{(1-\eta_p)/2}$，我们得到 P 的一维射影余表示，其因子系为 $\nu_{\boldsymbol{k}}(p_1,\ p_2)=e^{-i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_{p_1,\ p_2}}$。与非共面情形一样，只有当 $[\nu_{\boldsymbol{k}}]=1$ 时才存在解。因此，具有母空间群 G 的 I型共面自旋空间群的同态 ρ 分类为

$$\bigcup_{\eta\in\mathrm{Hom}(P,\mathbb{Z}_2)}\ \bigcup_{\boldsymbol{k}\in\mathcal{W}_\eta^{\mathrm{c}}}H^{1,\eta}\big(P,U(1)\big)\Big/\mathbb{Z}_2,\tag{47}$$

其中

$$\mathcal{W}_\eta^{\mathrm{c}}=\Big\{\boldsymbol{k}\neq\mathbf{0}\ \Big|\ R_p\boldsymbol{k}=\eta_p\boldsymbol{k}\ (\mathrm{mod}\ \widehat{L})\ \forall p\in P,\ [\nu_{\boldsymbol{k}}]=1\Big\},\tag{48}$$

并且 $\mathbb{Z}_2$ 按如下方式作用：$(\boldsymbol{k},\ \theta)\mapsto(-\boldsymbol{k},\ -\theta)$，如式（21）所示。

比较式（43）–（47）与第 IIE 节中的相应方程可知，I型共面自旋空间群的分类与具有平凡反幺正分级的 I 型非共面 SSG 的分类相同χ。因此可以直接沿用第 IIE 节中的枚举结果。

4. Type 2

对于 II型共面自旋空间群，我们首先考虑 ρ_T(T) $\cong V_4\cong D_2$。由于 2T 属于 ρ_T 的核（D_2 的指数为二），ρ_T 可经由 T/2T 分解，并可写为

$$\rho_T(\boldsymbol{t})=\begin{pmatrix}e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}} & 0\\ 0 & e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}}\end{pmatrix},\qquad\forall\,\boldsymbol{t}\in L,\tag{49}$$

或者，经过嵌入（40）后，

$$\mathrm{diag}\big(\rho_T(\boldsymbol{t}),\det\rho_T(\boldsymbol{t})\big)=\mathrm{diag}\big(e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}},\ e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}},\ e^{i(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{t}}\big).\tag{50}$$

波矢 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 是不同的非零时间反演不变动量，因此第三个分量由$\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2$调制；后者也是一个非零时间反演不变动量。这是式（24）的共面对应形式。

要指定 ρ_T，我们指定 $\ker\rho_T=\langle 2\mathrm{T}\ \boldsymbol{t}_0\rangle$，其中 $\boldsymbol{t}_0\in$ T/2T 非零。与非共面情形一样，$\boldsymbol{t}_0$ 分为三类：$\boldsymbol{a}_i$、$\boldsymbol{a}_i+\boldsymbol{a}_j$和 $\boldsymbol{a}_1+\boldsymbol{a}_2+\boldsymbol{a}_3$。然而，不同于非共面情形，自旋平面区分了法向轴与面内轴，因此剩余等价群是 $D_4/V_4\cong C_2$，而不是 S_3：元素 $-1=R_z(\pi)$ 保持不变，而 σ 和 $-\sigma$ 互换。因此，对每个核而言，将 V_4 的三个非零元素分配给三个非零陪集共有 3! $=6$ 种方式，其中$6/|C_2|=3$ 种彼此不等价。这意味着，在 $\boldsymbol{t}_0$ 的三类中，各自分别有 9、9 和 3 个不等价同态 ρ_T；若三个晶格方向均不等价，则总数为 21；若某些方向等价，数量则相应减少。

V_4 在 $O(2)$ 中的正规化子是

$$N_{O(2)}(V_4) = D_4 = V_4 \rtimes \{E, R\} \cong V_4 \rtimes C_2, \tag{51}$$

其中，$R = \sigma_1$ 是交换两个面内轴、因而也交换 σ 和 $-\sigma$的反射。因此$\rho(G) \subset D_4$，并且我们将其分解为

$$\rho(g) = D(g)\, R^{s_p}, \qquad s_p \in \{0, 1\}, \quad D(g) \in V_4. \tag{52}$$

同态条件要求

$$D(g_1)\pi_{p_1}\big(D(g_2)\big) = D(g_1 g_2), \qquad \forall\, g_1, g_2 \in G, \tag{53}$$

其中 $\pi_p(d) = R^{s_p} d [R^{s_p}]^{-1}$。$\rho_T$ 与 $\rho(s(p))$之间的协变条件变为

$$\pi_p\big(\rho_T(\boldsymbol{t})\big) = \rho_T(R_p \boldsymbol{t}). \tag{54}$$

一个非平凡的 π_p 交换 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$。将 $\sigma_p \in S_2$ 记为相应的置换，式（54）变为

$$R_p \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_{\sigma_p(i)} \pmod{\widehat{L}}, \qquad i = 1, 2. \tag{55}$$

因此，点群操作只能保持或交换这两个波矢。如果式（55）对某个$p \in P$不成立，则不允许出现这对 $\{\boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2\}$；如果成立，则 s_p 由诱导的置换确定。

最后，条件（7）要求

$$D(s(p_1))\, \pi_{p_1}\big[D(s(p_2))\big] = \rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})\, D(s(p_1 p_2)), \qquad \forall\, p_1, p_2 \in P. \tag{56}$$

写作

$$D(s(p)) = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1^s(p)} & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2^s(p)} \end{pmatrix}, \qquad \theta_i^s(p) \in \{0, \pi\}, \tag{57}$$

方程（56）化简为

$$\theta_i^s(p_1) + \theta^s_{\sigma_{p_1}^{-1}(i)}(p_2) = \boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{t}_{p_1,p_2} + \theta_i^s(p_1 p_2) \pmod{2\pi}, \qquad i = 1, 2. \tag{58}$$

要使解存在，障碍 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2}) \in H^{2,\,\pi}(P,\ V_4)$ 必须是平凡的。一旦 $[\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2})] = 1$，不等价的 $D(s(p))$ 可由 $H^{1,\,\pi}(P,\ V_4)$ 分类，这可以通过求解方程（58）得到。这里可以看出，G 的非对称型性只影响障碍 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,\,p_2})$。

现在我们考虑 $\rho_T(\mathrm{T}) \cong D_1$。由于 2T 仍在核中，$\rho_T$ 仍采取（49）的形式，但现在两个波矢之一为零。无论是 $\boldsymbol{k}_1 = 0$ 还是 $\boldsymbol{k}_2 = 0$ 都无关紧要，因为两者可由 R互换。不失一般性，我们可以取 $\boldsymbol{k}_1 = 0$，于是 $\rho_T(\mathrm{T}) = \{E, \sigma\}$。同态 ρ_T由一个晶格平移 $\boldsymbol{t}_0 \in \mathrm{T}/2\mathrm{T}$ 决定。当三个晶格方向彼此不等价时，有七种不等价的 ρ_T。

在 $O(2)$ 中，D_1 的正规化子是 $N(D_1) = V_4$，它也与 D_1 对易，因此就是中心化子。因此 $\rho(G) \subset V_4$。协变条件变为

$$\rho_T(\boldsymbol{t}) = \rho_T(R_p \boldsymbol{t}), \tag{59}$$

因此

$$R_p \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_i \pmod{\widehat{L}}, \qquad i = 1, 2, \ \forall p \in P. \tag{60}$$

这限制了 允许的波矢。剩下的任务是确定所有 $p \in P$ 的 $\rho(s(p))$。写作

$$\rho(s(p)) = D(p) = \begin{pmatrix} e^{i\theta_1^s(p)} & 0 \\ 0 & e^{i\theta_2^s(p)} \end{pmatrix}, \qquad \theta_i^s(p) \in \{0, \pi\}, \tag{61}$$

方程（56）可化为

$$\theta_i^s(p_1) + \theta_i^s(p_2) = \boldsymbol{k}_i \cdot \boldsymbol{t}_{p_1,p_2} + \theta_i^s(p_1 p_2) \pmod{2\pi}, \qquad i = 1, 2. \tag{62}$$

要使解存在，障碍 $\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2}) \in H^2(P, V_4)$ 必须是平凡的。一旦 $[\rho_T(\boldsymbol{t}_{p_1,p_2})] = 1$，不等价的 $D(s(p))$ 可由 $H^1(P, V_4)$ 分类，而后者可通过求解方程（62）得到。

对于等价条件，共面自旋空间群还必须考虑 $O(2)$ 中的共轭。由自同构和连续族导致的等价条件，与非共面自旋空间群的情况相同。

B. 共线自旋空间群

当磁矩沿单一轴排列（我们将其视为 z 轴）时，纯自旋子群为

$$\mathcal{S} = SO(2)_z \rtimes \{E, \mathcal{P}R_x(\pi)\}, \qquad \mathcal{P}R_x(\pi) = \mathrm{diag}(-1, 1, 1), \tag{63}$$

其中， $SO(2)_z$ 绕公共轴旋转磁矩，而 $\mathcal{P}R_x(\pi)$则结合了绕垂直 x 轴的 π 旋转与自旋反演，因此使沿 z 的磁矩保持不变。商群$\mathcal{G}/\mathcal{S} \cong G$ 与一个空间群同构。

共线自旋空间群由同态 $\varrho = \chi : \ G \to O(1) = \{E, \mathcal{P}\} \cong \{\pm 1\}$确定，并嵌入 $O(3)$中为 $\chi(g)\mathbb{I}_3$。这样的同态恰好是 G的反幺正 $\mathbb{Z}_2$ 分级，因此，共线自旋空间群对应于 I、III 和 IV 型磁空间群。等价地，它们按 $\mathrm{Hom}(G, \mathbb{Z}_2)$分类，并将通过 G 的自同构相关的自旋空间群合并。

在全纯框架内，所有共线自旋空间群都属于类型 0：平移全纯纯粹是一个分级， $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = \chi_T(\boldsymbol{t}) = \pm 1$。该分级通过下式定义一个时间反演不变动量波矢 $\boldsymbol{k}_\chi \in \{\boldsymbol{0}\} \cup :$

$$\chi_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}}. \tag{64}$$

当 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$ 磁矩在平移下保持不变时；当 $\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$ 反幺正平移使磁矩反向，从而形成交错共线晶格。

IV. 自旋空间群的枚举算法细节与名称

在前几节中，我们概述了枚举算法。本节将详细介绍该算法，并说明我们如何命名自旋空间群。

A. 枚举算法详述

1. *Algorithm for Type 0*

为了枚举所有不等价的 ρ_P，我们固定一个正规子群 $H \triangleleft P$，并使用 $\rho_P(P) \simeq P/H$，如式（12）所示。枚举过程如下：

(i) 枚举 P 的所有正规子群 H。

(ii) 对每个 H，构造商群乘法表，并确定与 P/H 抽象同构的旋转群 $S_i \subset SO(3)$。

(iii) 对每个允许的 S_i，选取一个同构 $P/H \to S_i$。

(iv) 将这个同构提升为同态 $\rho_P : P \to SO(3)$。

(v) 合并自旋共轭同态，将所得的 ρ_P 与分级 χ 结合，并对完整表示 $\varrho = \chi\rho$ 施加空间等价。

这些步骤仅涉及有限群。所有正规子群都通过从 $\{e\}$ 开始，并反复添加某个额外元素的正规闭包来获得。可能的像为 C_n (n =1、2、3、4、6)、 D_n (n = 2、3、4、6)、 T 和 O。为确定一个同构，选择 P/H 的生成元，并枚举它们在 S_i 中的像，要求元素阶相同，且这些像生成整个目标群。通过乘法扩展每个赋值。如果表示同一个商群元素的两个词具有不同的像，则舍弃该赋值。只有当映射 f 是双射并满足

$$f(qq') = f(q)f(q') \qquad \text{for all } q, q' \in P/H.$$

因此，群阶和元素阶可用于初步排除，而乘法律则确立同构。

对于此列表中的旋转群， S_i 的每个自同构都由其 $SO(3)$ 正规化子诱导。对于循环群，生成元唯一可能的变化是 $g \mapsto g$ 和 $g \mapsto g^{-1}$；对于二面体群，这类变化可由主轴和横轴的旋转实现。 D_2 的正规化子置换其三个轴，正规化子 O 实现 T 的所有自同构，而 O 的自同构都是内自同构。因此，在自旋共轭之后，每个允许的商群只需一个同构即可。不同的核会一直保留到取空间商为止。

2. *Algorithm for Type 1*

枚举母空间群为 G 的类型 1 自旋空间群的步骤如下：

(i) 枚举所有二指数正规子群 $P_0 \triangleleft P$；每个子群都定义一个分级 η： $P \to \{\pm 1\}$。同时也包括平凡分级。(ii) 对于每个 η，确定满足协变条件的波矢，见方程（19）。平移全纯为 $\rho_{\mathrm{T}}(t) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot t)J_z}$。

(iii) 求解受阻 1-余循环方程，见方程（20）。解是否存在可用于检验 $[\nu_{\boldsymbol{k}}] = 1$，其解则通过方程（17）确定点群截面矩阵。构造 $\rho(ts(p)) \quad = \rho_{\mathrm{T}}(t)\rho(s(p))$.

(iv) 合并自旋共轭同态，并通过完整的波矢和截面相位解识别连续族，具体方法见本小节余下部分。

(v) 将所得的 ρ 与 χ 结合，并对 $\varrho = \chi\rho$ 施加空间等价条件。

步骤 (ii) 和 (iii) 最好一并进行。二者都归结为求解线性同余式，只需进行一次史密斯标准形分解，即可判定是否有解，并一次性求出所有解。在本原基 $\{\boldsymbol{a}_j\}$ 中，写作 $\boldsymbol{k} = \sum_j q_j \boldsymbol{b}_j$，其中 $\boldsymbol{a}_i \cdot \boldsymbol{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$，且 $t_{p_1,\ p_2} = \sum_j c_j(p_1,\ p_2)\boldsymbol{a}_j$。令 M_p 为 R_p 在该基下的整数矩阵，并设 $x_p = \theta(s(p))/(2\pi)$。所需方程为

$$(M_p^T - \eta_p I)\boldsymbol{q} = 0 \pmod 1, \qquad x_{p_1} + \eta_{p_1} x_{p_2} - x_{p_1 p_2} - \boldsymbol{q} \cdot \boldsymbol{c}(p_1, p_2) = 0 \pmod 1.$$

第一个方程是协变条件 (19)，第二个方程是 1-余循环方程 (20)；这里将它们改写为同余式，以便合并成一个整数系统。绕 z 轴旋转角度 $2\pi v$ 的公共自旋旋转，会使 x_p 变为 $(1 - \eta_p)v$。对于非平凡的 η，选择满足 $\eta_r = -1$ 的 r，并通过 $x_r = 0$ 固定此规范，因为此时的位移为 $2v$，它遍历整个 $\mathbb{R}/\mathbb{Z}$；而对于 $\eta_p = 1$，相位是规范不变量。对于平凡的 η，不存在连续的规范方向。剩余的共轭操作 $R_x(\pi)$ 会同时将 $(\boldsymbol{q}, x)$ 映射为 $(-\boldsymbol{q}, -x)$。

将方程（包括规范条件）叠加起来，可得到一个整数同余式 $Az = b$（模 1）。对于指定的波矢，$z = x$ 和 b 包含其扩展相位；对于联合问题，$z =$（$\boldsymbol{q}$，x）以及$b = 0$。由于扩展向量 $\boldsymbol{c}$（p_1，p_2）是固定的整数数据，所有方程对于联合未知量（$\boldsymbol{q}$，x）都是线性的，因此可以组装成一个整数同余系统。计算史密斯标准形 $UAV = D$，其中 U，V为整数酉矩阵，D的大小为 $m \times n$，具有正的对角元素 $d_1 \mid d_2 \mid \cdots \mid d_r$，其余位置为零。由于 $z = Vy$，且 V是酉矩阵，这是合理的，所有解为

$$y_i = \frac{(Ub)_i + m_i}{d_i} \pmod 1, \quad m_i = 0, \ldots, d_i - 1 \quad (i \le r), \qquad (Ub)_i = 0 \pmod 1 \quad (i > r).$$

涉及 $i > r$ 的条件指的是 D 的 $m - r$ 个零行，并决定系统是否可解；当系统欠定时，与 D 的 $n - r$ 个零列对应的坐标在 $\mathbb{R}/\mathbb{Z}$中是自由的。因此，不相容系统可以检测出障碍，而相容系统则给出所有解，包括所有挠率（有限阶）分支。在固定 $\boldsymbol{k}$时，规范不等价解对于 $H^{1,\ \eta}$（P，$U(1)$）构成一个主齐次空间——即群在其上自由且传递地作用的集合：选定一个特解后，其余所有解都可通过加上齐次解得到。

对于联合系统，保留所得的不相交仿射环面

$$X_\eta = \coprod_a C_a, \qquad C_a = z_a + B_a(\mathbb{R}/\mathbb{Z})^{d_a}.$$

偏移量 z_a 是有理数，矩阵 B_a 是整数矩阵。因此，每个分量都是一个仿射环面：一个有理偏移加上作用于 $(\mathbb{R}/\mathbb{Z})^{d_a}$ 的整数矩阵。将这些分量与 $2\boldsymbol{q} = 0$模一相交，即施加时间反演不变动量条件，从而区分离散表示与各族。时间反演不变动量$\boldsymbol{q} = 0$ 表示计入类型 0，非零时间反演不变动量表示则单独保留。每个正维分量的其余部分定义了一般族；孤立的非时间反演不变动量

解仍作为离散条目保留。保留联合解至关重要，因为倒易绕行$\boldsymbol{q} \to \boldsymbol{q} + \boldsymbol{K}$不会改变 ρ_{T}，却会使截面相位发生偏移，因此可能置换与给定波矢相连的相分支；只有联合解才能一致地追踪这种置换。

3. *Algorithm for Type 2*

对于给定的母空间群 G，所有类型 2 自旋空间群的枚举方法如下：

(i) 确定模 $2L$ 下在 P 作用下不变的每个非零 $t_0 \in L/2L$。对于每个允许的 t_0，根据其湮灭子三元组 $\{\boldsymbol{k}_i\}$ 构造 ρ_{T}。

(ii) 确定 模倒易晶格确定 σ： $P \to S_3$ 来自 $R_p\boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{k}_{\sigma_p(i)}$，并构造 $S(p$).

(iii) 求解方程 (38)，并满足约束条件 (37)，其中 $D(s(p))$，并构造 $\rho(ts(p)) = \rho_{\mathrm{T}}(t)D(s(p))S(p)$。

（iv）将平移矩阵和截面矩阵经同时自旋共轭后相关的同态合并。

（v）将所得的 ρ 与 χ 合并，并对完整的 ϱ施加空间等价。

在步骤（ii）中，令 $P_\sigma \boldsymbol{e}_i = \boldsymbol{e}_{\sigma(i)}$ 并选取 $S_\sigma = \mathrm{sgn}(\sigma)P_\sigma$。于是 $S_\sigma \in SO(3)$ 且 $S_\sigma S_\tau = S_{\sigma\tau}$，因此提升不会引入额外的因子系。在步骤（iii）中，令$d_{p,\ i} = \theta_i^s(p)/\pi$ 并令$b_{p_1p_2,\ i} = \boldsymbol{k}_i \cdot t_{p_1,\ p_2}/\pi$ 均模二取值。方程（37）和（38）构成一个有限线性系统，其定义在 $\mathbb{F}_2$上：

$$d_{p_1,i} + d_{p_2,\sigma_{p_1}^{-1}(i)} - d_{p_1p_2,i} = b_{p_1p_2,i}, \qquad \sum_i d_{p,i} = 0.$$

高斯消元要么检出不一致的行，要么给出一个特解 $d^{(0)}$ 以及齐次核的一组基h_1、.....、 h_r。于是所有解均为

$$d = d^{(0)} + \sum_{j=1}^{r} \epsilon_j h_j, \qquad \epsilon_j \in \mathbb{F}_2.$$

用 V_4 中的一个固定元素共轭会加上一个余边界。对这些余边界取商，得到 $H^{1,\ \pi}(P,\ V_4)$的主齐次空间；还必须纳入轴置换。等价地，像本文这样，构造所有仿射解，并在同一个带符号置换作用下比较它们的完整矩阵集合。这样既消除了两种冗余，也不会通过彼此独立的基变换来认定矩阵等价。

4. *Equivalence relations*

We ad选择 t h相同的等 ival价关系 con diti作为 Ref. [3]. Three levels of equival价关系必须 be distinguished 。*(1)* 自旋空间共轭。如果一个共同的自旋变换能将两组表示的所有矩阵共轭起来，则这两组表示等价。对于 $O(3)$ 表示，通过 Q 和 $-Q$ 进行共轭的效果相同，因此只需 $SO(3)$ 变换。Type 0 构造消除了上述同构选择。类型 1 需要连续相位规范，并同时反转波矢和相位。类型 2 需要同时对平移矩阵和截面矩阵进行带符号置换。

(2) G的自同构。按照保手征约定，对正规化 G 的仿射坐标变换 $\{A \mid \boldsymbol{o}\}$ 施加 $\varrho \sim \varrho \circ \alpha$，其中在本原基中， $A \in SL(3, \mathbb{Z})$。这种变换成为 G 的自同构的条件是

$$AM_pA^{-1} = M_{\sigma(p)}, \qquad \boldsymbol{u}_p = A\boldsymbol{\tau}_p + (I - M_{\sigma(p)})\boldsymbol{o} - \boldsymbol{\tau}_{\sigma(p)} \in \mathbb{Z}^3.$$

此处 $\boldsymbol{u}_p$ 表示变换后的截面与所选截面之间相差的晶格平移。求出整数点群正规化子的生成元，将其限制到实际的本原晶格上，然后取行列式为一的子群。对于三斜晶系群和单斜晶系群，线性正规化子是无限的，因此其生成元必须从适当的整数线性群中取得；不能通过枚举有界条目的整数矩阵来找到它们。对于其余晶体系统，线性正规化子是有限的，可以根据其不变轴或不变正定度量进行枚举。

接下来必须保留非对称操作扩张的稳定子，而不能只保留那些已经保持该扩张的单个生成元：上面找到的生成元不一定保持扩张类，因此必须计算该类的稳定子，而不是生成元的子集。将截面平移排列成 τ，并将矩阵 $I - M_p$ 排列成 B_0。令 C_0 为一个整数矩阵，其行张成 B_0的完整整数湮没子，从而 $C_0B_0 = 0$ 以及 C_0 的整数行张成构成整个湮没子。于是，$C_0\tau$ 模一表示模去原点平移后的扩张数据。由于截面平移具有共同的有限分母，它在线性正规化子作用下的轨道是有限的。遍历此轨道。若 t_ξ 将初始类映射到类 ξ，且某个生成元 s 将 ξ 映射到 ζ，则元素 $t_\zeta^{-1} s\, t_\xi$ 生成其稳定子。对于每个这样的元素 h，它通过 $\tau^h_{\sigma(p)} = h\boldsymbol{\tau}_p$作用于 $\boldsymbol{\tau}$，利用史密斯约化求解 $B_0\boldsymbol{o} = \tau - \tau^h$模一，以获得仿射提升。还要包括 $B_0\boldsymbol{o} = 0$ 模一的离散（挠）解。核 B_0 中的连续原点平移与 G对易；整数原点平移诱导内自同构，因而产生自旋共轭，所以二者都不会贡献新的等价关系。

对于类型 1，仿射生成元按照以下方式拉回数据 $(\boldsymbol{q},\ \eta,\ x)$：

$$\boldsymbol{q}' = A^T\boldsymbol{q}, \qquad \eta'_p = \eta_{\sigma(p)}, \qquad x'_p = x_{\sigma(p)} + \boldsymbol{q}\cdot\boldsymbol{u}_p \pmod 1.$$

恢复自旋规范，并比较完整的仿射分量，包括其中的相位。同一自同构必须作用于 χ；仅对 ρ 和 χ 分别取空间商并不足够：必须先让自同构作用于完整的 $\varrho = \chi\rho$，然后才能取商。对于离散表示，对所有平移矩阵和截面矩阵应用相同的拉回。

(3) 连续族。连续族由完整的一般表示分支的延拓确定，其离散组成数据保持固定。在上述联合解中，每个正维 C_a 在分别记录其特殊表示后，都携带一个一般族标签。η 相同或具有共同的波矢域，本身并不能证明不同分量等价。在固定波矢处，无穷小相位变化满足 $z_{p_1} + \eta_{p_1} z_{p_2} - z_{p_1p_2} = 0$。对 p_2 取平均可得

$$z_p = (1 - \eta_p)\bar{z}, \qquad \bar{z} = |P|^{-1}\sum_{p\in P} z_p.$$

因此，唯一的连续相位自由度就是已被消除的自旋规范。由此， C_a 到其波矢像 K_a 的投影是一个连通有限覆盖，并保留倒易周期绕行时的相位变化。

移除特殊波矢可能会使 C_a 的一般部分断开，但不会产生新的延续族。这些部分通过同一分支公式的延续来识别，包括经过

零波矢，或通过其倒易单值群来识别。特殊表示本身仍保留各自独立的标签。即使无关分支的极限矩阵相同，这一规定也不允许在它们之间切换。

采用相同的手性约定时，这种去重方式与参考文献 [3]中的方式等价。

B. 自旋空间群的记号

我们通过在母空间群 G 的完整赫尔曼–莫甘符号上添加自旋上标来表示每个自旋空间群（SSG），这与 Chen等人 [5]的做法相似，但也有一些不同。一般而言，自旋空间群表示为

$$^{K}B_{\mathbf{k}_\chi}\ ^{\sigma_1}g_1\ ^{\sigma_2}g_2\ ^{\sigma_3}g_3\cdots\sigma_0. \tag{65}$$

$Bg_1g_2g_3\cdots$是母群的赫尔曼–莫甘符号。 $B\in\{P,A,B,C,I,F,R\}$ 表示晶格类型， g_i， $i\neq 0$ 是空间生成元。每个空间生成元 g_i 都以上标形式带有与之对应的自旋操作 σ_i 。复合符号（如 n/m ）的两个分量分别标注。平凡的 σ_i 可以省略。 σ_0 表示纯自旋操作。我们分别用 $\sigma_0=\ ^{\infty m}1$ 和 $^{m}1$表示共线和共面自旋空间群。对于非共面自旋空间群，可省略 σ_0 。 $\boldsymbol{k}_\chi$ 是反幺正分级波矢；当其为零时可以省略。 K 表示平移的自旋操作。对于 0 型自旋空间群，可省略 K。对于 1 型自旋空间群， K是 ρ_T（$\boldsymbol{t}$）$=e^{-i(2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$中的波矢 $\boldsymbol{k}$，对应于沿 $\boldsymbol{t}$平移时的自旋旋转 R_z（$2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}$）。对于 2 型，我们写作 $K=\langle\sigma_{t_1},\ \sigma_{t_2},\ \sigma_{t_3}\rangle$，其中 σ_{t_i}是与原始平移 $\boldsymbol{t}_i$对应的自旋操作。 $\boldsymbol{k}_\chi$ 和 $\boldsymbol{k}$ 以常规晶胞坐标表示。对于连续族， $\boldsymbol{k}$ 以模一的自由参数显式表示。

为在三维自旋空间中表示所有自旋操作，将共面操作 $D\in O(2)$（其中自旋 z 轴垂直于自旋平面）通过保定向提升$D\mapsto\mathrm{diag}(D,\det D)$嵌入 $SO(3)$中，并将共线操作 $\chi\in\{\pm1\}$ 嵌入 $O(3)$ 中，表示为 χI_3，其中 $\bar{1}$ 表示自旋反转。对于 1型自旋空间群，生成元 $g_i=\{R_i|\boldsymbol{\tau}_i\}$ 中的非平凡分数平移 $\boldsymbol{\tau}_i$会贡献连续自旋旋转 $R_z(2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_i)$。上标 σ_i 消除了这种由平移引起的旋转¯，仅记录约化后的自旋操作 $S(g_i)=R_z(-2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_i)S(g_i)$；该操作保留所有行列式分级符号，并在连续族中保持离散性；完整自旋矩阵可由 $S(g_i)=_R_z(2\pi\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{\tau}_i)S(g_i)$ 恢复。对于所有其他平移类型，上标直接给出 $S(g_i)$。

在此，我们以母群 $P3$ 为例说明自旋空间群的记号；自旋空间群列于表 II中。

V. 自旋空间群的层次分类

我们的枚举算法为自旋空间群提供了一个自然的层次分类框架。同态 $\varrho:\ G\to O(n)$ 在两个群扩张之间诱导出如下态射：

$$\begin{array}{ccccccccc} 1 & \longrightarrow & \mathrm{T} & \longrightarrow & G & \longrightarrow & P & \longrightarrow & 1 \\ & & \downarrow{\scriptstyle\varrho_{\mathrm{T}}} & & \downarrow{\scriptstyle\varrho} & & \downarrow{\scriptstyle\varrho_P} & & \\ 1 & \longrightarrow & \varrho_{\mathrm{T}}(\mathrm{T}) & \longrightarrow & \varrho(G) & \longrightarrow & \varrho_P(P) & \longrightarrow & 1 \end{array}$$

其中 $\varrho(G)\subset N_{O(n)}(\varrho_T(\mathrm{T}))$，$\varrho_P(P)=\varrho(G)/\varrho_T(\mathrm{T})$。

我们可以定义如下的自旋空间群层级。

表 II. 母空间群为 $P3$ （编号 143）的所有自旋空间群。第一列给出自旋晶格类型（表 III），第二列给出 SSG 名称，第三列给出 Xiao 等人分类中的对应标识符。 [3]17 种自旋晶格类型中，有三种——P.2.2、N.1.4 和 N.2.2——不适用于该母群。

自旋晶格类型	SSG 名称	Xiao 等人的标识符
Collinear		
L.0.1	$P\,3\,^{\infty m}1$	L143.1.1
L.0.2	$P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,3\,^{\infty m}1$	L143.2.1
Coplanar		
P.0	$P\,3\,^{m}1$	P143.1.1
P.0	$P\,^{3_z}3\,^{m}1$	P143.4.1
P.1.1	$(0,0,\pm 2)P\,3\,^{m}1$	P143.3.1
P.1.1	$(0,0,\pm 12)P\,^{3_z}3\,^{m}1$	P143.4.2
P.1.2	$(0,\ 0,\ u_0)P\,3\,^{m}1$	P143.5.1
P.1.2	$(0,\ 0,\ u_0)P\,^{3_z}3\,^{m}1$	P143.5.2
P.1.2	$(\pm 23,\pm 23,u_0)P\,^{3_z}3\,^{m}1$	P143.5.3
P.2.1	$\langle 1,1,2_x\rangle\,P\,3\,^{m}1$	P143.2.1
Noncoplanar		
N.0.1	$P\,^{3_z}3$	N143.4.1
N.0.1	$P\,3$	N143.1.1
N.0.2	$P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,^{3_z}3$	N143.10.2
N.0.2	$P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,3$	N143.9.1
N.1.1	$(0,0,\pm 2)P\,3$	N143.3.1
N.1.1	$(0,0,\pm 12)P\,^{3_z}3$	N143.4.2
N.1.2	$(0,\ 0,\ u_0)P\,3$	N143.5.1
N.1.2	$(0,\ 0,\ u_0)P\,^{3_z}3$	N143.5.2
N.1.2	$(\pm 23,\pm 23,u_0)P\,^{3_z}3$	N143.5.3
N.1.3	$(0,0,\pm 2)P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,3$	N143.2.1
N.1.3	$(0,0,\pm 2)P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,^{3_z}3$	N143.10.1
N.1.5	$(0,0,u_0)P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,3$	N143.11.1
N.1.5	$(0,\ 0,\ u_0)P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,^{3_z}3$	N143.11.2
N.1.5	$(\pm 23,\pm 23,\ u_0)P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,^{3_z}3$	N143.11.3
N.2.1	$\langle 2_x,2_y,1\rangle\,P\,^{3^2_{[1,1,-1]}}3$	N143.16.1
N.2.3	$\langle 2_x,2_y,1\rangle\,P_{(0,0,\frac{1}{2})}\,^{3^2_{[1,1,-1]}}3$	N143.16.2

首先，我们仅考虑晶格群 T，它在 $L\ \mathbb{R}^3$ 中定义了一个晶格。根据 $L\ \mathbb{R}^3 \rtimes O(3)$ 的正规化子的作用，晶格可分为 14 种布拉菲格子类型。现在，我们仅考虑自旋空间群的平移对称性，它由 T 和 ϱ_T 决定。T 和 ϱ_T 为每个格点上的自旋确定了一个相关晶格，我们称之为自旋晶格。自旋晶格的空间对称性仍可分为 14 种布拉菲格子类型。为了进一步刻画自旋晶格的自旋对称性，我们引入两个新概念：平移霍洛诺米类型和自旋布拉维晶格类型。前者由 ϱ_T(T) 决定，而后者由 (T ϱ_T) 决定，并定义为：

平移霍洛诺米类型：当且仅当两个自旋晶格具有等价的 $\varrho_T(\mathrm{T})$ 时，它们属于相同的平移霍洛诺米类型。

自旋布拉维晶格类型： 当且仅当两个自旋晶格属于相同的布拉菲格子类型且具有等价的 ϱ_T时，它们才属于相同的自旋布拉维晶格类型。

请注意，由于共线、共面和非共面自旋空间群具有不同的纯自旋群，它们的自旋晶格始终是不等价的，因此需要分别讨论。

根据此定义，平移全纯类型有无穷多种。为方便起见，我们将无穷多种类型归为一个族，并定义**自旋晶格类型**的概念。现在我们逐一进行枚举。

自旋晶格类型

共线自旋空间群。存在两种 ϱ_T（T），平凡或 $\mathbb{Z}_2$。因此我们将共线自旋晶格分为两种类型 [4]。如果两个共线自旋晶格具有等价的χ_T，则它们属于同一种自旋布拉菲晶格类型。共线自旋布拉菲晶格类型对应于磁性布拉维晶格类型。

共面自旋空间群。我们将共面自旋晶格分为 5 种自旋晶格类型：

P.0：ρ_T(T) $=\{E\}$，其在 O(2) 中的正规化子为 O(2)。

P.1.1：ρ_T(T) $=\{E, R_z(\pi)\}=C_{2z}\subset SO(2)_z$，其正规化子为 $SO(2)_z\rtimes\{E,\sigma\}=O(2)$，其中 $\sigma=$diag(1，-1)。正规化子在 ρ_T(T) 上的作用是平凡的。

P.1.2：ρ_T(T) $=C_{nz}\subset SO(2)_z$ $(n>2)$ 或 ρ_T(T) 在 $SO(2)_z$ 中稠密。这是一个无限族。正规化子为 $SO(2)_z\rtimes\{E,\sigma\}=O(2)$。正规化子在 ρ_T(T) 上的作用非平凡。

P.2.1：ρ_T(T) $=D_1=\{1,\sigma\}$，其正规化子为 $V_4=\{E,-E,\sigma,-\sigma\}$。$V_4$ 在 ρ_T(T) 上的作用是平凡的。

P.2.2：ρ_T(T) $=V_4=\{E,-E,\sigma,-\sigma\}$，其正规化子为 $V_4\rtimes\{1,R\}$，其中 $R=\sigma_{1\text{。}}$ R 在 ρ_T(T) 上的作用是非平凡的。

给定布拉菲格子 L，自旋布拉维晶格类型由传播波矢 $\boldsymbol{k}$ 表征（适用于 P.0、P.1.1、P.1.2 和 P.2.1 类型），而 P.2.2 类型则由 $\boldsymbol{k}_1$，$\boldsymbol{k}_2$ 表征。自旋布拉菲晶格类型的数量是无限的，因为 P.1.2 类型支持无限多个 ρ_T(T)。

非共面自旋空间群。我们将非共面自旋晶格分为 10 种自旋晶格类型：

N.0.1：ϱ_T(T) $=\{E\}$，其在 O(3) 中的正规化子为 O(3)。

N.0.2：ϱ_T(T) $=\{E,\mathcal{P}\}$，其在 O(3) 中的正规化子为 O(3)。

N.1.1：ϱ_T(T) $=\{1,R_z(\pi)\}=C_{2z}$，其在 O(3) 中的正规化子为 $(SO(2)_z\rtimes\{E,R_x(\pi)\})\times Z_2^{\mathcal{T}}=(SO(2)_z\rtimes C_{2x})\times Z_2^{\mathcal{T}}$。正规化子对 ϱ_T(T) 的作用是平凡的。

N.1.2：ϱ_T(T) $=C_{nz}\subset SO(2)_z$ $(n>2)$ 或 ϱ_T(T) 在 $SO(2)_z$ 中稠密。这是一个无限族。正规化子是 O(3) 中的 $(SO(2)_z\rtimes\{E,R_x(\pi)\})\times Z_2^{\mathcal{T}}=(SO(2)_z\rtimes C_{2x})\times Z_2^{\mathcal{T}}$。正规化子在 ϱ_T(T) 上的作用是非平凡的。

N.1.3：ϱ_T(T) $=\{E,\sigma_z\}=D_{1z}$，其中 $\sigma_z=$diag(1，1，-1)。正规化子是 O(3) 中的 $O(2)_z\times D_{1z}$，其在 ϱ_T(T) 上的作用是平凡的。

N.1.4：ϱ_T(T) $=\{E,R_z(\pi)\ \sigma_z,\ \mathcal{P}\}=C_{2z}\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$，其正规化子是 O(3) 中的 $(SO(2)_z\rtimes\{E,R_x(\pi)\})\times Z_2^{\mathcal{T}}=(SO(2)_z\rtimes C_{2x})\times Z_2^{\mathcal{T}}$。正规化子在 ϱ_T(T) 上的作用是平凡的。

N.1.5：ϱ_T(T) $=C_{nz}\times Z_2^{\mathcal{T}}\cong C_{nh}$ $(n>2)$或 ϱ_T(T) $=\langle\mathcal{P}R_z(2\pi/n)\rangle$ $(n>2)$，或 ϱ_T(T) 是 $SO(2)_z\times Z_2^{\mathcal{T}}$中的一个稠密子群，且 χ 非平凡。正规化子为 O(3) 中的 $(SO(2)_z\rtimes\{E,R_x(\pi)\})\times Z_2^{\mathcal{T}}=(SO(2)_z\times C_{2x})\rtimes Z_2^{\mathcal{T}}$。正规化子的作用在 ϱ_T(T) 上是非平凡的。

N.2.1：ϱ_T(T) $=\{E,R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}=V_4$，其正规化子是 O(3) 中的 $O\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}=(V_4\rtimes S_3)\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。$S_3$ 对 ϱ_T(T) 的作用是非平凡的。

N.2.2：ϱ_T(T) $=\{E,\sigma_x,\sigma_y,R_z(\pi)\}=C_{2v}$，其正规化子是 O(3) 中的 $D_4\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}=(C_{2v}\rtimes S_2)\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。$S_2$对 ϱ_T(T) 的作用非平凡。

---

[4] 它们分别对应普通布拉菲格子和黑白布拉菲格子。

N.2.3： ϱ_T(T) $=\{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}=V_4\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$，其正规化子是 O(3) 中的 $O\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}=($ $V_4\rtimes S_3)\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。 S_3 对 ϱ_T(T) 的作用非平凡。

现在，我们纳入点群元素。在空间群的分类框架中，晶格 L 和点群 P 共同决定 G的算术晶体类。在考虑磁性晶体序时，我们可以引入以下概念:

自旋晶体类： 由 (ϱ_T(T) $\varrho_P(P)$) 决定。两个自旋空间群属于同一个自旋晶体类，当且仅当它们具有等价的 ϱ_T(T) 和 $\varrho_P(P)$，且 $\varrho_P(P)\subset N_{O(n)}(\varrho_T(\mathrm{T}))/\varrho_T(\mathrm{T})$。

自旋算术晶体类： 由 (T P， ϱ_T， ϱ_P) 决定。两个自旋空间群属于同一个自旋算术晶体类，当且仅当它们属于同一个算术晶体类，并且具有等价的 ϱ_T 和ϱ_P。

VI. 17 种自旋晶格类型及其磁序

在本节中，我们将逐一介绍 17 种自旋晶格类型，并讨论它们对应的磁序。自旋晶格类型由平移全纯像 ϱ_T(T) $\in O(n)$ 决定，而平移全纯像可以用传播波矢来刻画。我们列出每种类型的传播波矢及其磁化分布。我们还将讨论哪些已知磁序属于该类型，并给出具有代表性的例子。在全部 17 种自旋晶格类型中，有五种此前尚未被确认。

为表示磁性分布，我们注意到平移不变性要求

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t})=\varrho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})=\chi_T(\boldsymbol{t})\rho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}), \tag{66}$$

其中， $\chi_T(\boldsymbol{t})=e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\in\{\pm1\}$ 是由时间反演不变动量（TRIM） $\boldsymbol{k}_\chi$控制的反幺正平移分级，而 $\rho_T(\boldsymbol{t})$ $\in SO(3)$是正自旋旋转分量。下文中， $m_0(\boldsymbol{r})$或其笛卡尔分量表示满足 $m_0(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t})=m_0(\boldsymbol{r})$的元胞周期振幅分布，对所有$\boldsymbol{t}\in L$均成立； $\{\hat{\boldsymbol{e}}_x,\hat{\boldsymbol{e}}_y,\hat{\boldsymbol{e}}_z\}$ 是自旋空间中固定的正交归一笛卡尔基。

A. 共线自旋晶格类型

在共线自旋晶格中，所有磁矩均沿单一轴排列，此处选定为$\hat{\boldsymbol{e}}_z$。正自旋旋转是平凡的（ρ_T(T) $=\{E\}$），平移全纯完全由反幺正分级 χ_T确定，其中 $\chi_T(\boldsymbol{t})=e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$。

1. L.0.1: Translation-Invariant Collinear

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t})=1$，波矢为 $\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{0}$。 ϱ_T(T) $=\{E\}$。

因为 晶格平移对所有磁矩的作用都是平凡的，实空间磁化分布 i s

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})=m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{67}$$

磁性晶胞与其底层晶体学原胞相同。这种自旋晶格类型涵盖了传统铁磁体（如体心立方铁和面心立方镍）、亚铁磁体（如 Fe_3O_4 和钇铁石榴石） [8], 以及共线交错磁体 [9]。一些反亚铁磁体也属于这一类型。

2. L.0.2: Staggered Collinear

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$, $\boldsymbol{k}_\chi \in$时间反演不变动量。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, \mathcal{P}\} \cong \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。

满足 $\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t} = \pi$ （模 2π）的晶格矢量平移会翻转自旋取向。磁结构的形式为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{r}/\pi} m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{68}$$

此类型描述的是二分共线反铁磁体，其中自旋相反的子晶格由实空间平移相联系。典型例子包括 NiO 等经典的 II 型反铁磁体 [10]。

B. 共面自旋晶格类型

在共面体系中，磁矩被限制在同一个平面内，此处将其选作 xy 自旋平面（$m_z(\boldsymbol{r}) = 0$）。纯自旋群为 $\mathcal{S} = \{E, \mathcal{P}R_z(\pi)\}$。由于 $\mathcal{P}R_z(\pi)$ 在 xy 平面内作用为恒等变换，独立的反幺正平移分级 χ_T 是冗余的，平移全纯由 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \rho_T(\mathrm{T}) \subset O(2)$ 表示。

1. P.0: Translation-Invariant Coplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = \mathbb{I}_2$，波矢为 $\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E\}$。

每个晶格平移都使共面磁矩构型保持不变：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y. \tag{69}$$

这种类型对应于磁性原胞与晶体学原胞重合的共面磁体。典型实例包括三角形和 kagome 手性反铁磁体，例如六方 Mn_3Sn、Mn_3Ge 和 $LuMnO_3$ [11–14]。

2. P.1.1: Staggered Coplanar

De定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，波矢为 $\boldsymbol{k} \in$时间反演不变动量。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, R_z(\pi)\} \cong C_{2z}$。

在自旋平面内， π旋转作用为 $R_z(\pi) = -\mathbb{I}_2$。实空间磁构型在由平移关联的格点间交替变号：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\left[m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right]. \tag{70}$$

虽然每个晶胞内的磁矩仍为非共线排列，但整体晶格在晶格平移下形成二分反铁磁体。

3. P.1.2: Planar Spiral

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，其一般波矢为 $\boldsymbol{k} \notin$时间反演不变动量。 $\varrho_T(\mathrm{T}) \subset SO(2)_z$但 $\varrho_T(\mathrm{T}) \not\cong C_{2z}$。

平移时，磁矩在 xy 平面内连续旋转：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = m_{\perp}(\boldsymbol{r})\left[\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right]. \tag{71}$$

此类型描述正规平面螺旋和摆线磁序。当 $\boldsymbol{k}\in\mathbb{Q}^3$时，磁序为公度。当 $\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3\backslash\mathbb{Q}^3$时，磁序为非公度。典型实例包括多铁钙钛矿 $BiFeO_3$ [15, 16], 的长周期摆线，以及镝和钬的基面螺旋 [17]。这些磁序只能近似实现理想化的圆偏振螺旋：$BiFeO_3$ 摆线在室温下近乎呈圆形，但在低温下会略呈椭圆形，并出现微弱的三次谐波 [16], ；而镝和钬的六方各向异性会使磁矩聚集；在钬中，这种各向异性还会产生带有高次谐波的自旋滑移结构 [18]，并在低于 19 K 时形成锥形相 [17]。

4. *P.2.1: Reflection-Staggered Coplanar*

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t})$ = 对角$\big((\quad -1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi}, (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\big)$，其中 $\boldsymbol{k}_1=\boldsymbol{0}$和 $\boldsymbol{k}_2\in$时间反演不变动量。 ϱ_T(T) $=\{E,\sigma\}$ $\sim$ $=D_1$. 晶格平移对面内自旋的作用，相当于关于 $\hat{\boldsymbol{e}}_x$ 轴的反射。显式的磁化分布为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y. \tag{72}$$

该 x分量是平移不变的，并在 Γ处形成均匀分量，而与之正交的 y 分量则在 $\boldsymbol{k}_2$处交替变化。这种类型存在于倾斜反铁磁结构中，例如外场 [19]下 EuTe 的倾斜II型相。这里需要指出的是，在零场下，EuTe 实际上是 L.0.2 类型的共线II型反铁磁体。至关重要的是，我们的框架揭示， D_1 平移全纯可保护整个布里渊区内严格共线的动量空间自旋纹理（参见第 八节）。

5. *P.2.2: Biaxial-Staggered Coplanar*

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t})$ = diag$\big((-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\big)$，其中有两个不同的非零时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}_1$, $\boldsymbol{k}_2$ $\in$时间反演不变动量。ϱ_T(T) $=\{E,-E,\sigma,-\sigma\}\cong V_4$。

两个正交的面内自旋分量分别沿两个不同的晶体调制方向交错排列：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y. \tag{73}$$

由于两个分量均为交错排列，净磁化强度恒为零。此类型描述正交双波矢（$2Q$）共面反铁磁序。典型代表是呈现双-$\boldsymbol{q}$非共线刺猬状自旋涡旋晶体（SVC）序的铁基超导体，例如Ni和Co取代的$CaKFe_4As_4$ [20], ，以及在铁氧硫族化物（如$La_2O_2Fe_2OSe_2$ [21]）中观察到的非共线双-$\boldsymbol{q}$ 相。

C. 非共面自旋晶格类型

非共面自旋晶格的磁矩遍历自旋空间的三个维度。纯自旋子群是平凡的，反幺正平移分级 $\chi_T(\boldsymbol{t})$ $= e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$ 独立于正自旋旋转 ρ_T。

1. N.0.1: Translation-Invariant Noncoplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = \mathbb{I}_3$，波矢为 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E\}$。
每个晶格平移都保持局域自旋矢量的三维取向：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{74}$$

完整的三维非共面磁构型完全位于晶体学原胞内。典型材料是烧绿石晶格上的全进全出（AIAO）四面体序，例如5d烧绿石铱酸盐$Eu_2Ir_2O_7$ 和$Nd_2Ir_2O_7$ [22, 23]。

2. N.0.2: Staggered Noncoplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\,\mathbb{I}_3$，其中TRIM $\boldsymbol{k}_\chi$非零。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, \mathcal{P}\} \cong \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。
满足 $\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t} = \pi$（模 2π）的平移会同时反转磁矩的三个空间分量：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\left[m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z\right]. \tag{75}$$

这描述了层状或交错非共面系统，其中各个非共面单元在平移相关子晶格之间发生反转。一个材料实例是铁矾化合物$KFe_3(OH)_6(SO_4)_2$，其kagome层呈现伞状序，具有微小的面外倾斜，并沿堆垛轴 [24, 25]交替取向。面内序属于 $q = \boldsymbol{0}$ 类型，而反铁磁堆垛使沿 c的磁周期加倍，因此相对于结构晶胞，传播矢量为 $(0,\ 0,\ \frac{1}{2})$。倾斜很弱，由Dzyaloshinskii–Moriya相互作用，即自旋–轨道耦合驱动；在零自旋–轨道耦合极限下，该序退化为共面 120° 结构。因此，铁矾仅近似实现了这种非共面类型。

3. N.1.1: Bipartite Conical

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，其中 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$和非零时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, R_z(\pi)\} \cong C_{2z}$.
横向自旋分量在各晶胞之间交替变号，而沿 $\hat{\boldsymbol{e}}_z$ 方向的纵向分量保持不变：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\left[m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right] + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{76}$$

磁矩在圆锥面上的两个离散位置之间交替。这种构型描述了二分反铁磁体中由沿圆锥轴方向的外加磁场诱导的二分伞状相或倾斜非共面态。

4. N.1.2: Conical Spiral

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，其中 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$和一般的 $\boldsymbol{k} \notin$时间反演不变动量。当 $\boldsymbol{k} \in \mathbb{Q}^3$时， $\varrho_T(\mathrm{T}) \cong C_n$。当 $\boldsymbol{k} \in \mathbb{R}^3\backslash\mathbb{Q}^3$时， $\varrho_T(\mathrm{T})$是 $SO(2)_z$的无限子群。

横向自旋分量绕$\hat{\boldsymbol{e}}_z$连续进动，调制矢量为$\boldsymbol{k}$，而均匀的净磁化仍沿圆锥轴定向：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = m_\perp(\boldsymbol{r})\left[\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right] + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{77}$$

有理数$\boldsymbol{k}$对应公度磁序，而无理数$\boldsymbol{k}$对应非公度磁序。这种类型对应于教科书中常见的圆锥螺旋：在手性和非中心对称螺旋磁体中，沿螺旋轴施加磁场或存在内部磁场时，广泛观测到这种磁序；其中包括处于场诱导圆锥相的 B20 螺旋磁体 MnSi 和 FeGe [26, 27]。对于 B20 化合物，圆锥相需要施加磁场；它们的零场态是 P.1.2 的共面螺旋。理想圆锥同样只能近似实现，因为磁晶各向异性可能使螺旋偏离理想的圆形圆锥螺旋。

5. *N.1.3: Reflection-Staggered Noncoplanar*

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，其中$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k}\in$时间反演不变动量。$\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, \sigma_z\} \cong D_{1z}$。

自旋反演与绕$\hat{\boldsymbol{e}}_z$的π旋转的联合作用，等效于关于xy平面的自旋反射（$\sigma_z = \mathcal{P}R_z(\pi)$），从而得到显式的磁化分布

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = [m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y] + (-1)^{\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{78}$$

该自旋晶格代表一种此前未被识别的磁序，颠覆了圆锥磁体的传统几何构型。在传统的圆锥结构中，纵向分量是均匀的，而横向分量则呈交错或螺旋状。在 N.1.3 中，这种行为发生了反转：纵向分量严格交错且相互补偿（$M_z = 0$），而横向面内分量具有平移不变性，从而允许在横向平面内存在有限的自发净磁化（$\boldsymbol{M}_\perp \neq \boldsymbol{0}$）。

6. *N.1.4: Alternating Bipartite Conical*

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，具有不同的时间反演不变动量$\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}_\chi$。$\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, R_z(\pi)\ \sigma_z,\ \mathcal{P}\} \cong C_{2z}\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。显式磁化场在双圆锥曲面上的四个离散自旋方向之间交替：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{(\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\left[m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right] + (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{79}$$

这种序尚未在既有分类中得到确认。由于横向和纵向磁矩扇区分别在两个不同的非零波矢（$\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi$）处交替，因此两个扇区在 Γ 处都不存在分量。这使得四亚晶格非共面几何结构中的净磁化（$\boldsymbol{M} = \boldsymbol{0}$）得到精确且由对称性强制的补偿，而无需连续旋转对称性。

7. *N.1.5: Antiferromagnetic Conical Spiral*

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}$，其中非零 TRIM $\boldsymbol{k}_\chi$以及一般的$\boldsymbol{k}$。当$\boldsymbol{k}\in\mathbb{Q}^3$和$\boldsymbol{k}_\chi \neq m\boldsymbol{k}$($m\in\mathbb{Z}$)时，$\varrho_T(\mathrm{T}) \cong \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}\times C_n$。当$\boldsymbol{k}\in\mathbb{Q}^3$和$\boldsymbol{k}_\chi = m\boldsymbol{k}$($m\in\mathbb{Z}$)时，$\varrho_T(\mathrm{T}) = \langle\mathcal{P}R_z(2\pi/n)\rangle$。当$\boldsymbol{k}\in\mathbb{R}^3\backslash\mathbb{Q}^3$时，$\varrho_T(\mathrm{T})$是$SO(2)_z\times\mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$的无限子群。

横向自旋分量在 xy 平面内连续进动，而纵向自旋分量则由反幺正分级调制：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\Big\{m_\perp(\boldsymbol{r})\left[\cos(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + \sin(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}+\phi(\boldsymbol{r}))\,\hat{\boldsymbol{e}}_y\right] + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z\Big\}. \tag{80}$$

这种自旋晶格类型并非单一的平移霍洛诺米类型，而是由无穷多个平移霍洛诺米类型组成。根据 ϱ_T (T) 的形式，我们可以进一步将此类型分为三个子类型。公度磁序与非公度磁序的区别在于 $\boldsymbol{k}$ 是否为无理数。对于有理数 $\boldsymbol{k}$，$\boldsymbol{k}_\chi$ 是否为 $\boldsymbol{k}$ 的整数倍也会产生影响。

这是一种新型的圆锥螺旋序。传统上，人们认为圆锥螺旋必然具有沿圆锥轴方向的有限均匀磁化强度，这通常需要施加外加磁场。N.1.5 展示了一种本征补偿的零场圆锥螺旋的存在。在中子散射中，N.1.5 在布里渊区中心 Γ 处没有磁布拉格峰（即在 $\boldsymbol{K}$ 处没有峰）；相反，其纵向峰出现在有限动量 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{K}$ 处，而手性横向峰则以边带形式出现在 $\boldsymbol{k}_\chi\pm\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ 处。

8. N.2.1: Orthogonal 3Q Noncoplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = \mathrm{diag}\big((-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\big)$，其中 $\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{0}$ 以及三个时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}_1$，$\boldsymbol{k}_2$，$\boldsymbol{k}_3$ 满足 $\sum_i \boldsymbol{k}_i=\boldsymbol{0}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\} = V_4$。
三个正交自旋轴各自沿一个不同的时间反演不变动量波矢独立交错：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + (-1)^{\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{81}$$

这对应于典型的三重 q ($3Q$) 非共面序，具有立方或四面体对称性。已知的物理实现包括 UO_2 中的横向 $3\boldsymbol{k}$ 序 [28]，以及 USb 中的纵向$3\boldsymbol{k}$ 序 [29]。

9. N.2.2: Canted 2Q Noncoplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\,\mathrm{diag}\big((-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\big)$，其中 $\sum_i \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{0}$ 以及 $\boldsymbol{k}_\chi\in\{\boldsymbol{k}_i\}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = \{E, \sigma_x, \sigma_y, R_z(\pi)\} \cong C_{2v}$。

不失一般性，我们可以取 $\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{k}_3$。由于 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_3 = 2\boldsymbol{k}_3 \equiv \boldsymbol{0}$ （模 L），反幺正符号调制在第三个自旋分量上相互抵消，从而产生磁化场

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{(\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_1)\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + (-1)^{(\boldsymbol{k}_3+\boldsymbol{k}_2)\cdot\boldsymbol{t}/\pi}m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z. \tag{82}$$

这种此前未被识别的双波矢（$2Q$）自旋晶格打破了多-Q序的三轴等价性。标准的 3Q 态会确保三个轴方向均实现完全补偿，而 N.2.2 允许沿未调制自旋轴（$M_z\neq 0$）存在未补偿均匀磁化，其余两个正交方向则保持严格交错并得到补偿（$M_x = M_y = 0$）。这为多-Q 非共面晶格中的自发弱铁磁性提供了一种平移全纯机制，即使完全不存在自旋轨道耦合。

10. N.2.3: Staggered Orthogonal 3Q Noncoplanar

定义： $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\,\mathrm{diag}\big((-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi},\ (-1)^{\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\big)$，其中 $\sum_i \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{0}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi \notin \{\boldsymbol{0},\boldsymbol{k}_1,\boldsymbol{k}_2,\boldsymbol{k}_3\}$。 $\varrho_T(\mathrm{T}) = V_4 \times \mathbb{Z}_2^{\mathcal{T}}$。

所有三个正交自旋分量均受各自的 $\boldsymbol{k}_i$调制，并由 $\boldsymbol{k}_\chi$使其在不同子晶格间同时反转：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = (-1)^{\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}/\pi}\left[(-1)^{\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_x(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_x + (-1)^{\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_y(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_y + (-1)^{\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}/\pi} m_z(\boldsymbol{r})\,\hat{\boldsymbol{e}}_z\right]. \tag{83}$$

尽管 N.2.3 呈现局域四面体非共面排列，表面上与典型3Q态 N.2.1 相似，但它属于另一种3Q有序。三个传播波矢为 $\boldsymbol{q}_i = \boldsymbol{k}_\chi + \boldsymbol{k}_i$，其总和为

$$\boldsymbol{q}_1 + \boldsymbol{q}_2 + \boldsymbol{q}_3 = \boldsymbol{k}_\chi \mod \widehat{L}, \tag{84}$$

而 N.2.1 的三个传播波矢之和为零。因此，可以通过中子衍射信号区分 N.2.1 和 N.2.3。此外，两者具有不同的物理性质。对于 N.2.3，存在晶格平移 $\boldsymbol{t}_0$ ，使得平移全纯群的行列式为负：$\det[\varrho_T(\boldsymbol{t}_0)] = (-1)^3 \det[\rho_T(\boldsymbol{t}_0)] = -1$。这一平移全纯群导致局域标量自旋手性发生精确的空间符号反转，因此宏观均匀磁八极矩 $\mathcal{O}_{xyz} = M_x M_y M_z$ 必定恒为零（$\mathcal{O}_{xyz} \equiv 0$）。因此，标准的3Q 态（N.2.1）允许有限的二阶霍尔响应和非零非线性磁化率 $\chi^{(2)}$；而 N.2.3 则代表一种零八极矩3Q磁有序，其中所有二阶偶极响应均被平移对称性严格禁止。

七. 中子衍射特征

周期性磁序可写为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \sum_i \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}(\boldsymbol{r})\, e^{i\boldsymbol{Q}_i\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{85}$$

其中 $\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}(\boldsymbol{r})$ 具有晶格周期性。中子衍射通过布拉格峰的位置测量波矢$\boldsymbol{Q}_i$，并通过偏振测量测量偏振 $\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}/|\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}|$。每个波矢为 $\boldsymbol{Q}$ 的傅里叶分量会在 $\boldsymbol{Q}+\boldsymbol{K}$处产生一组布拉格峰，其中 $\boldsymbol{K}$ 遍历倒易晶格。由于平移全纯确定了这两者，17种类型各自具有独特且明确的衍射特征[5]。

为获得每种自旋晶格类型的傅里叶分量，我们使用平移协变方程：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = \varrho_T(\boldsymbol{t})\,\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}), \qquad \forall\, \boldsymbol{t} \in \mathrm{T}. \tag{86}$$

ϱ_T 的特征值决定波矢 $\boldsymbol{Q}_i$，其特征子空间决定每个傅里叶分量的极化，即，

$$\varrho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}(\boldsymbol{r}) = e^{i\boldsymbol{Q}_i\cdot\boldsymbol{t}}\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{Q}_i}(\boldsymbol{r}). \tag{87}$$

---

[5] 在实际测量中，布拉格峰可能消失或受到抑制，而偏振通常是射影测量的。这里我们讨论理想测量条件，在这种条件下，所有17种类型都具有不同的衍射特征。

表 III。自旋空间群的17种普适自旋-晶格类型，根据平移全纯 ϱ_T(T) $\subset O(3)$ 以及传播波矢进行分类。其中， $\boldsymbol{k}_\chi$ 是决定反幺正平移分级 χ_T 的时间反演不变动量。除非另有说明，TRIM表示非零时间反演不变动量；对于类型 2 非共面系统， $\boldsymbol{k}_i (i = 1, 2、3)$ 是满足 $\sum_i \boldsymbol{k}_i = \boldsymbol{0}$ 的三个非零时间反演不变动量。

自旋晶格类型	波矢	傅里叶波矢和偏振
Collinear		
L.0.1 平移不变共线	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$	沿唯一自旋轴的线性排列，位于 Γ
L.0.2 交错共线	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$	沿唯一自旋轴的线性排列，位于 $\boldsymbol{k}_\chi$
Coplanar		
P.0 平移不变共面	$\boldsymbol{k} = \boldsymbol{0}$	面内于 Γ
P.1.1 交错共面	$\boldsymbol{k}$ ∈时间反演不变动量	面内于 $\boldsymbol{k}$
P.1.2 平面螺旋	$\boldsymbol{k}$ 一般	$\pm\boldsymbol{k}$处具有相反手性的圆偏振
P.2.1 反射交错共面	$\boldsymbol{k}_1 = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_2 \in$ 时间反演不变动量	在 Γ 和 $\boldsymbol{k}_2$处的两种正交线偏振
P.2.2 双轴交错共面	$\boldsymbol{k}_1$, $\boldsymbol{k}_2 \in$ 时间反演不变动量	$\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$处的两种正交线偏振
Noncoplanar		
N.0.1 平移不变非共面	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$	Γ处的无限制三维极化
N.0.2 交错非共面	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$	$\boldsymbol{k}$处的无限制三维极化
N.1.1 二分锥形	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{k} \in$ 时间反演不变动量	Γ处为纵向； $\boldsymbol{k}$处为横向
N.1.2 圆锥螺旋	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}$， $\boldsymbol{k}$ 一般	Γ处沿轴线性； $\pm\boldsymbol{k}$处为圆偏振
N.1.3 反射交错非共面	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k} \in$时间反演不变动量	$\boldsymbol{k}$处为纵向； Γ处为横向
N.1.4 交替双分格圆锥形	$\boldsymbol{k} \in$时间反演不变动量， $\boldsymbol{k}$ $\chi \notin \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}\}$	$\boldsymbol{k}_\chi$处为纵向； $\boldsymbol{k}$处为横向 $\chi + \boldsymbol{k}$
N.1.5 反铁磁圆锥螺旋	$\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$, $\boldsymbol{k}$ 通用	沿轴线性于 $\boldsymbol{k}_\chi$； 在 $\boldsymbol{k}$ 处圆偏振 $\chi \pm \boldsymbol{k}$
N.2.1 正交 3Q 非共面	$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_i \in$ 时间反演不变动量	$\boldsymbol{k}_i$处的三种正交线偏振
N.2.2 倾斜 2Q 非共面	$\boldsymbol{k}_i \in$时间反演不变动量， $\boldsymbol{k}$ $\chi \in \{\boldsymbol{k}_i\}$	$\boldsymbol{k}$处的三种正交线偏振（其中一个是 Γ） $\chi + \boldsymbol{k}_i$
N.2.3 交错正交三重 q 非共面型	$\boldsymbol{k}_i \in$时间反演不变动量， $\boldsymbol{k}$ $\chi \notin \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_i\}$	在 $\boldsymbol{k}$ 处的三个正交线偏振 $\chi + \boldsymbol{k}_i$

A. 傅里叶分量和偏振

类型 *0*。 对于平移不变磁序， $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}}$，因此

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r} + \boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}} \boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}), \tag{88}$$

其解为

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r}) = \boldsymbol{M}_{\boldsymbol{k}_\chi}(\boldsymbol{r})\, e^{i\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{r}}, \tag{89}$$

其中 $\boldsymbol{M}_{\boldsymbol{k}_\chi}(\boldsymbol{r})$ 具有周期性。因此，在 $\boldsymbol{k}_\chi + \boldsymbol{K}$ 处只有一组布拉格峰；对于非共面磁序，独立偏振方向的数量为三个；对于共面磁序，为两个；对于共线磁序，为一个。

类型 *1*。 对于类型 1 自旋晶格，我们可以在不失一般性的情况下设定，

$$\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}} e^{-i(\boldsymbol{k} \cdot \boldsymbol{t}) J_z}. \tag{90}$$

表 IV. 表 III中自旋晶格类型的代表性材料。破折号表示据我们所知尚未发现相应的代表性材料；尽管如此，对称性分析仍表明相应类型是允许的。

Type	代表性材料和序
L.0.1	具有晶体学磁胞的铁磁体、亚铁磁体和共线交错磁体
L.0.2	II 型反铁磁体，例如 NiO
P.0	磁胞与以下对象相同的三角形和 kagome 120° 反铁磁体。 晶体学原胞相同的三角格子和 kagome$_3$反铁磁体，例如 Mn_3Sn、Mn_3Ge 和 $LuMnO_3$
P.1.1	—
P.1.2	正则平面螺旋和摆线，例如 $BiFeO_3$ 中的摆线以及非公度镝和钬中的平面螺旋
P.2.1	处于倾斜型 II 类反铁磁相的 EuTe
P.2.2	$CaKFe_4As_4$ (Ni/Co) 的双-$\boldsymbol{q}$ 刺猬状 SVC 序；$La_2O_2Fe_2OSe_2$ 处于非共线双-$\boldsymbol{k}$ 相
N.0.1	全入全出型烧绿石
N.0.2	$KFe_3(OH)_6(SO_4)_2$，具有伞形序：$q=\mathbf{0}$ 平面内，沿 c反铁磁堆垛（$\boldsymbol{k}=(0,\ 0,\ \frac{1}{2})$相对于结构晶胞）；弱倾斜由自旋轨道耦合诱导
N.1.1	—
N.1.2	圆锥螺旋，例如 MnSi 和 FeGe 中由磁场诱导的横向圆锥相
N.1.3	—
N.1.4	—
N.1.5	—
N.2.1	面心立方和近藤晶格中的四面体 $3Q$ 态，例如，具有横向 $3\boldsymbol{k}$ 序的 UO_2 和具有纵向 $3\boldsymbol{k}$ 序的 USb
N.2.2	—
N.2.3	—

使用酉矩阵对 $\varrho_T(\boldsymbol{t})$ 进行对角化

$$U=\frac{1}{\sqrt{2}}\begin{pmatrix}1 & 1 & 0\\ i & -i & 0\\ 0 & 0 & \sqrt{2}\end{pmatrix}, \tag{91}$$

我们得到

$$U^{-1}\varrho_T(\boldsymbol{t})U=\operatorname{diag}\big(e^{i(\boldsymbol{k}_\chi-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}},\, e^{i(\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}},\, e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\big). \tag{92}$$

定义 $M^{(\pm)}=M_x\pm iM_y$，方程（86）和（92）给出

$$M^{(\pm)}(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t})=e^{i(\boldsymbol{k}_\chi\pm\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}}M^{(\pm)}(\boldsymbol{r}),\qquad M_z(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t})=e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}M_z(\boldsymbol{r}), \tag{93}$$

因此

$$M^{(\pm)}(\boldsymbol{r})=M^{(\pm)}_{\boldsymbol{k}_\chi\pm\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{r})\,e^{i(\boldsymbol{k}_\chi\pm\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{r}},\qquad M_z(\boldsymbol{r})=M_{z,\boldsymbol{k}_\chi}(\boldsymbol{r})\,e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{r}}, \tag{94}$$

具有周期包络。相同表达式也适用于共面和非共面 I 型晶格；这两种情况的区别仅在于所包含的分量不同。

对于共面自旋空间群，磁矩位于 xy 平面，因此 $M_z=0$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi=\mathbf{0}$。当 $\boldsymbol{k}$ 为一般点时，$M_{(+)}$和 $M^{(-)}$分别出现在 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$和 $-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$处，具有手性相反的圆偏振；^这就是平面螺旋 P.1.2。当 $\boldsymbol{k}$ 为时间反演不变动量时，两个动量在模 L意义下重合，因此这两个

圆偏振分量在 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ 处合并为一个具有面内偏振的峰；这就是交错共面晶格 P.1.1。

对于非共面自旋空间群，三个分量均存在，且 $\boldsymbol{k}_\chi$ 可能非零。当 $\boldsymbol{k}$ 为一般点时，存在三组布拉格峰：一组位于时间反演不变动量 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{K}$，其偏振沿轴方向；另一对位于 $\boldsymbol{k}_\chi\pm\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$，具有手性相反的圆偏振；对于 $\boldsymbol{k}_\chi=\widehat{\mathbf{0}}$，这对应 N.1.2，对于 $\boldsymbol{k}_\chi\neq\mathbf{0}$，则对应 N.1.5。当 $\boldsymbol{k}$ 为时间反演不变动量时，$\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi-\boldsymbol{k}$ 在模 L意义下重合，因此两个圆偏振分量合并为位于 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ 的一组具有面内偏振的峰。再加上位于 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{K}$ 的纵向峰，共有两组布拉格峰：N.1.1（$\boldsymbol{k}_\chi=\mathbf{0}$）对应 $\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$；N.1.3（$\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{k}$）对应$\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{K}$；N.1.4（$\boldsymbol{k}_\chi\notin\{\mathbf{0},\boldsymbol{k}\}$）对应 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$。

类型 *2*。 对于第二类自旋晶格，$\varrho_T(\boldsymbol{t})$ 为对角矩阵，且

$$M_i(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t})=e^{i(\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{t}}M_i(\boldsymbol{r}),\tag{95}$$

因此，每个笛卡尔分量都由各自的波矢调制：

$$\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})=\sum_{i=1}^{n}\boldsymbol{M}^{(i)}_{\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r})\,e^{i(\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i)\cdot\boldsymbol{r}},\tag{96}$$

其中，对于共面自旋空间群，$n=2$；对于非共面自旋空间群，$n=3$。包络 $\boldsymbol{M}^{(i)}_{\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i}(\boldsymbol{r})$ 是周期性的，且仅其第 i 个分量非零，因此相应布拉格峰的偏振沿第 i 个自旋轴呈线偏振。

对于共面自旋空间群，$\chi_T=1$，因此 $\boldsymbol{k}_\chi=\mathbf{0}$，这使得两个分量分别由 $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 调制。当 $\boldsymbol{k}_1$ 为零时，例如 $\rho_T(\mathrm{T})\cong D_1$，布拉格峰出现在 $\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{K}$ 处，且具有两种正交线偏振；这就是反射交错共面晶格 P.2.1。当两者均非零且彼此不同时，例如 $\rho_T(\mathrm{T})\cong V_4$，布拉格峰出现在 $\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{K}$ 处，且具有正交线偏振；这就是双轴交错共面晶格 P.2.2。

对于非共面自旋空间群，三个分量均存在。当 $\boldsymbol{k}_\chi=\mathbf{0}$ 时，三个布拉格峰位于 $\boldsymbol{k}_i+\boldsymbol{K}$，且对应三个彼此正交的线偏振；这就是正交 3Q 晶格 N.2.1。当 $\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{k}_a$ 时，三个动量中的一个为 Γ，另外两个为 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i$，且具有 $i\neq a$，因此布拉格峰出现在 $\boldsymbol{K}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i+\boldsymbol{K}$；沿第 a 轴的均匀分量由此与两个交错分量共存，形成倾斜 2Q 晶格 N.2.2。当 $\boldsymbol{k}_\chi\notin\{\mathbf{0},\boldsymbol{k}_i\}$ 时，三个动量均非零，三个正交偏振出现在 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_i+\boldsymbol{K}$；这就是交错正交 3Q 晶格 N.2.3。

所得特征汇总于表 III的最后一列。由于每种类型都有独特的布拉格峰位置和极化分布组合，极化中子衍射能够直接通过实验确定自旋晶格类型，进而确定自旋空间群类型，而无需搜索自旋空间群目录。

B. 与 Bertaut 表示分析的联系

Bertaut 表示分析 [30] 广泛用于中子衍射精修。在此方法中，先固定一个传播矢量，构造波矢的小群，并将磁结构分解为该小群不可约表示的基矢；这些基矢决定了傅里叶分量允许的方向。

在我们的框架中，如果选定自旋晶格类型，磁结构的基矢便会确定下来，无需进行表示分析。如果我们还考虑自旋空间群中的点群对称性，

不同位置上的磁矩还会受到进一步限制。通常，与磁空间群相比，自旋空间群在磁结构精修中允许的自由参数更少。

八、普遍物理后果

由于自旋晶格类型仅由对称性决定，每种类型都意味着该类型的所有材料均具有某些物理性质，而与交换相互作用的具体细节无关。这里我们推导快报中强调的四个推论。

A. 磁化强度的精确补偿

空间平均磁化强度，即序的 $\boldsymbol{q}=\mathbf{0}$ 傅里叶分量，为

$$\overline{\boldsymbol{M}}=\frac{1}{V_{\mathrm{cell}}}\int_{\mathrm{cell}}\boldsymbol{M}(\boldsymbol{r})\,d\boldsymbol{r}. \tag{97}$$

对平移协变性（86）在晶胞上取平均，得到

$$\overline{\boldsymbol{M}}=\varrho_T(\boldsymbol{t})\,\overline{\boldsymbol{M}},\qquad \forall\,\boldsymbol{t}\in\mathrm{T}. \tag{98}$$

因此，$\overline{\boldsymbol{M}}$ 必须属于全纯群的公共不变子空间，

$$\overline{\boldsymbol{M}}\in\mathrm{Fix}\big(\varrho_T(\mathrm{T})\big)=\bigcap_{\boldsymbol{t}\in L}\ker\big(\varrho_T(\boldsymbol{t})-\mathbb{I}_3\big). \tag{99}$$

如果该子空间是零维的，平移全纯会强制满足 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$ ，与局部磁矩的大小无关。

在 ϱ_T 的本征基中可以直接读出不变子空间：特征值为 $e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{t}}$ 的分量只有在 $\boldsymbol{Q}\equiv\mathbf{0}$ 时才会保留下来，因为对于 $\boldsymbol{Q}\neq\mathbf{0}$ ，某个平移给出 $e^{i\boldsymbol{Q}\cdot\boldsymbol{t}}\neq 1$，而该分量的不变性会迫使其为零。将这一规则应用于 17种类型，可得到以下结果。

共线。 对于 L.0.1， ϱ_T（$\boldsymbol{t}$） $=1$ ，每个分量都会保留下来，因此 $\overline{\boldsymbol{M}}$ 沿着自旋轴。对于 L.0.2，$\boldsymbol{k}_\chi\neq\mathbf{0}$ 意味着某个晶格矢量 $\boldsymbol{t}_0$ 满足 $\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}_0=\pi$；于是 ϱ_T（$\boldsymbol{t}_0$） $=-1$ 以及式（98）给出$\boldsymbol{M}=-\boldsymbol{M}$，因此 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。

共面。 对于 P.0， ρ_T(T) $=\{E\}$ 和 $\overline{\boldsymbol{M}}$ 在自旋平面内不受限制。对于 P.1.1， $\boldsymbol{k}$ 是一个非零的时间反演不变动量，因此两个圆偏振分量受 $\pm\boldsymbol{k}\neq\mathbf{0}$ 调制并消失，而共面性要求$M_z=0$；因此 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。对于 P.1.2， $\boldsymbol{k}$ 是一般且非零的，结论相同。对于 P.2.1，两个面内分量分别受$\mathbf{0}$ 和 $\boldsymbol{k}_2\neq\mathbf{0}$调制，因此只有未调制的分量保留下来，且 $\boldsymbol{M}$ 沿未调制的面内轴。对于 P.2.2， $\boldsymbol{k}_1$ 和 $\boldsymbol{k}_2$ 均非零，因此两个面内分量都消失，并且结合 $M_z=0$，有 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。

非共面。N.0.1 允许任意方向。在 N.0.2 中，三个分量都具有非零特征值$e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$，因此 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。对于类型 1，圆偏振基中的特征值为 $e^{i(\boldsymbol{k}_\chi-\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}}$、 $e^{i(\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k})\cdot\boldsymbol{t}}$ 和 $e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$。在 N.1.1 和 N.1.2 中， $\boldsymbol{k}_\chi=\mathbf{0}$ 和 $\boldsymbol{k}\neq\mathbf{0}$，因此横向分量消失，只有纵向分量保留，得到 $\boldsymbol{M}\parallel\hat{\boldsymbol{z}}$。在 N.1.3 中， $\boldsymbol{k}_\chi=\boldsymbol{k}$，因此纵向分量受 $\boldsymbol{k}\neq\mathbf{0}$ 调制并消失，而 $\boldsymbol{k}_\chi-\boldsymbol{k}=\mathbf{0}$ 和 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}=2\boldsymbol{k}\equiv\mathbf{0}$ 使横向分量不受限制；因此 $\boldsymbol{M}$ 位于横向平面内。在 N.1.4 和 N.1.5 中，三个波矢 $\boldsymbol{k}_\chi-\boldsymbol{k}$、 $\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}$和 $\boldsymbol{k}_\chi$ 均非零，因此所有分量都消失。对于类型 2，N.2.1 在 V_4作用下没有公共不变向量，其三个 π

旋转分别仅固定 x、 y 和 z 轴，因此 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。在 N.2.2 中，一个分量未调制（$\boldsymbol{k}_\chi+\boldsymbol{k}_a\equiv\mathbf{0}$），而另外两个分量受到调制，因此 $\boldsymbol{M}$ 沿着未调制自旋轴。在 N.2.3 中，三个波矢均非零，因此 $\boldsymbol{M}=\mathbf{0}$。

结果汇总于表 V。

表 V. 各自旋晶格类型下平移全纯所允许的均匀磁化 $\boldsymbol{M}$。“0”表示 $\boldsymbol{M}$ 恒等于零；方向表示 $\boldsymbol{M}$ 受限于该直线或平面；“任意”表示全纯群不施加任何约束。特定材料的纯自旋群和点群对称性可能进一步缩小允许集合；对于共面类型 P.1.1 和 P.1.2，纯自旋群会消除自旋平面法向的分量。

类型	允许 $\boldsymbol{M}$
L.0.1	沿自旋轴
L.0.2	0
P.0	在自旋平面内
P.1.1	0
P.1.2	0
P.2.1	沿未调制的面内轴
P.2.2	0
N.0.1	任意
N.0.2	0
N.1.1	沿旋转轴
N.1.2	沿旋转轴
N.1.3	位于横向平面内
N.1.4	0
N.1.5	0
N.2.1	0
沿未调制自旋轴的	N.2.2
N.2.3	0

对于九种补偿类型， $\boldsymbol{M}$ 的消失由SSG对称性所保证，而非像亚铁磁体中那样，通过不同子晶格磁矩的精细调谐抵消实现。因此，我们将这种现象称为精确磁化补偿。它为补偿磁体提供了一项对称性判据，且该判据独立于化学组成和具体的磁矩分布。

B. 非对易布里渊区的精确判据

在晶体系统中，酉平移群 T_u 的不可约表示定义了布里渊区。若 T_u 中的平移操作彼此对易，则 T_u 的不可约表示为

$$D^{\boldsymbol{k}}(\boldsymbol{t})=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}},\quad \forall \boldsymbol{t}\in \mathrm{L}_u, \tag{100}$$

其中， L_u 是与 T_u对应的晶格。由于 $\boldsymbol{k}$ 和 $\boldsymbol{k}+\boldsymbol{K}$， $\boldsymbol{K}\in L$ 对应于相同的不可约表示，我们可以将 $\boldsymbol{k}$ 限定在 $\mathbb{R}^3_F/\widehat{L}$，并将其称为第一布里渊区。

然而，当 T_u 中的平移操作不对易时，T_u 的不可约表示便不再是一维。在自旋空间群中，如果考虑电子系统，则应将 $SO(3)$ 自旋操作提升为 $SU(2)\times\{E,\mathcal{T}\}$，其中 $\mathcal{T}=i\sigma_2\mathcal{K}$。尽管 $\rho_T(\mathrm{T}_u)$ 总是阿贝尔的，但其

提升 $\widetilde{\rho}_T(\mathrm{T}_u)$ 可能是非阿贝尔的。如果 $\widetilde{\rho}_T(\mathrm{T}_u)$ 是非阿贝尔的，则某些平移彼此反对易，且 T_u 的不可约表示为二维（也记作 $\boldsymbol{k}$），从而在整个布里渊区内导致二重简并。在 Xiao 等人的工作中 [3], ，这被称为非对易布里渊区。

由于任意 $SO(2)$ 子群的 $SO(3)$提升后仍为阿贝尔群，因此非对易布里渊区只能由 V_4 的提升产生，而 V_4 是四元数群 Q_8。因此，充要条件为

$$\rho_T(\mathrm{T}_u) \cong V_4. \tag{101}$$

对于共面自旋空间群，$\chi_T = 1$，因此 T_u =T；P.2.2（其全纯群为 V_4）满足该条件，而 P.2.1（其全纯群为 $D_1 \cong \mathbb{Z}_2$）不满足。

对于非共面自旋空间群，我们区分两种情况。当 $\chi_T = 1$时，同样有 T_u =T，因此 N.2.1 满足式（101）。当 χ_T 非平凡时，T_u 在 T 中为二指数，且 $\rho_T(\mathrm{T}_u)$ 是 V_4，当且仅当在自旋空间上作用平凡的陪集 $\boldsymbol{t}_0$ （第 IIF节）是反幺正的，即

$$\chi_T(\boldsymbol{t}_0) = -1, \qquad \text{equivalently} \qquad \boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}_0 = \pi \ (\mathrm{mod}\ 2\pi). \tag{102}$$

回顾一下，三个波矢 $\boldsymbol{k}_i$ 恰好是被 $\boldsymbol{t}_0$湮灭的非零时间反演不变动量。于是$\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_0 = 0$ 对于 $\boldsymbol{k} \in \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{k}_3\}$ 以及 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}_0 = \pi$ 对于其他每一个非零时间反演不变动量，式（102）因此等价于

$$\boldsymbol{k}_\chi \notin \{\boldsymbol{0}, \boldsymbol{k}_1, \boldsymbol{k}_2, \boldsymbol{k}_3\}, \tag{103}$$

这正是定义 N.2.3 的条件。对于 N.2.2，$\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k}_a$ 属于该集合，因此 $\rho_T(\mathrm{T}_u) \cong \mathbb{Z}_2$，且布里渊区是对易的。

综合这三种情况，我们得到确切的群论判据：

当且仅当某个自旋空间群的自旋晶格属于双轴交错共面型（*P.2.2*）、正交 *3Q* 非共面型（*N.2.1*）或交错正交 *3Q* 非共面型（*N.2.3*）时，该自旋空间群才具有非对易布里渊区。

这一判据 告诉我们，只有某些类型的磁序具有非对易的布里渊区 e.

C. 无八极矩的 3Q 磁序

均匀磁八极矩是由三个自旋分量构成的最低阶时间反演奇轴性物理量，

$$\mathcal{O}_{xyz} = \overline{M_x M_y M_z} = \frac{1}{V}\int M_x(\boldsymbol{r}) M_y(\boldsymbol{r}) M_z(\boldsymbol{r})\, d^3\boldsymbol{r}, \tag{104}$$

并且它控制着领先阶的非线性（外加场的二阶）磁响应。对于第二类自旋晶格，全纯群在自旋基中是对角的。定义 $F = M_x M_y M_z$ 并使用 $M_\alpha(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = [\varrho_T(\boldsymbol{t})]_{\alpha\alpha} M_\alpha(\boldsymbol{r})$，我们得到

$$F(\boldsymbol{r}+\boldsymbol{t}) = \det\left[\varrho_T(\boldsymbol{t})\right] F(\boldsymbol{r}). \tag{105}$$

对晶体进行平均后得到

$$\mathcal{O}_{xyz} = \det\left[\varrho_T(\boldsymbol{t})\right] \mathcal{O}_{xyz}, \qquad \forall\, \boldsymbol{t} \in L. \tag{106}$$

因此，如果某个晶格平移满足 $\det\,\varrho_T(\boldsymbol{t}_0) = -1$，则均匀八极矩恒等于零。对于 N.2.1，$\varrho_T$(T) $= V_4 \subset SO(3)$ 以及

$$\det \varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i(\boldsymbol{k}_1+\boldsymbol{k}_2+\boldsymbol{k}_3)\cdot\boldsymbol{t}} = 1, \tag{107}$$

因此，八极矩在对称性允许下通常非零，$\mathcal{O}_{xyz} \propto m_x m_y m_z$。对于 N.2.3，全纯群为 $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\rho_T(\boldsymbol{t})$，其中 $\rho_T(\boldsymbol{t}) \in SO(3)$，因此

$$\det \varrho_T(\boldsymbol{t}) = \left(e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}\right)^3 \det \rho_T(\boldsymbol{t}) = e^{3i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}} = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}} = \chi_T(\boldsymbol{t}), \tag{108}$$

其中 $3\boldsymbol{k}_\chi \equiv \boldsymbol{k}_\chi$ (模 L)，因为 $\boldsymbol{k}_\chi$ 是一个非零时间反演不变动量。由于 $\boldsymbol{k}_\chi \neq \boldsymbol{0}$，某个晶格矢量 $\boldsymbol{t}_0$ 满足$\chi_T(\boldsymbol{t}_0) = -1$；由式(106)可得 $2\mathcal{O}_{xyz} = 0$，即

$$\mathcal{O}_{xyz} = 0 \tag{109}$$

恒等成立。

因此，N.2.1 允许均匀八极矩非零，而 N.2.3 则因平移对称性而禁止均匀八极矩。

D. 17 种自旋晶格类型的动量空间自旋纹理

自旋晶格类型不仅决定实空间调制，也决定动量空间自旋纹理的允许形式。我们定义

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = \sum_{n=1}^{d_{\boldsymbol{k}}} \langle\psi_{n\boldsymbol{k}}|\hat{\boldsymbol{s}}|\psi_{n\boldsymbol{k}}\rangle = \mathrm{Tr}\left[P_{\boldsymbol{k}}\hat{\boldsymbol{s}}\right], \tag{110}$$

其中 $\{\psi_{n\boldsymbol{k}}\}_{n=1}^{d_{\boldsymbol{k}}}$ 是 $\boldsymbol{k}$ 处的一个完整对称性多重态，而 $P_{\boldsymbol{k}}$ 将其投影到该多重态上。对于非简并能带$d_{\boldsymbol{k}} = 1$，式（110）化为通常的单能带自旋极化。

对于一个自旋空间群元素 $g = \{\varrho(g)|R_p|\boldsymbol{\tau}\}$，其中 $\varrho(g) = \chi(g)\rho(g)$，自旋算符变换为 $g\hat{\boldsymbol{s}}_a g^{-1} = \sum_b [\varrho(g)]_{ab}\hat{\boldsymbol{s}}_b$，而 $\boldsymbol{k}$ 处的多重态在 $\chi = +1$ 时映射到 $R_p\boldsymbol{k}$ 处的多重态，在 $\chi = -1$时映射到 $-R_p\boldsymbol{k}$ 处的多重态。两个多重态之间的映射是多重态空间上的一个酉矩阵；它在迹中消去，因此有

$$\boldsymbol{S}(R_p\boldsymbol{k}) = \varrho(g)\,\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) \quad (\chi = +1), \qquad \boldsymbol{S}(-R_p\boldsymbol{k}) = \varrho(g)\,\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) \quad (\chi = -1). \tag{111}$$

反幺正情形的动量自变量中出现负号，是因为非正则 ϱ包含自旋反演 $\mathcal{P}$，而自旋反演由时间反演实现，因此会反转 $\boldsymbol{k}$。

对于平移（$R_p = 1$），式（111）分解为两个独立条件。幺正平移要求

$$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = \rho_T(\boldsymbol{t})\,\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}), \tag{112}$$

因此，$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$必须位于酉整体化 T_u 的公共不变子空间 $\mathrm{Fix}(\rho_T)$ 中——这与式 (99) 中使均匀磁化保持不变的子空间相同。反幺正平移要求 $\boldsymbol{S}(-\boldsymbol{k}) = \varrho_T(\boldsymbol{t})\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$，因此确定了每个分量的宇称。第三节中的纯自旋群各自再增加一个条件：对于共线晶格，$\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$ 具有 S_z 偶宇称；对于共面晶格，面内分量为偶，面外分量为奇。最后一个条件由将式 (111) 应用于$U = \mathcal{P}R_z(\pi) = \mathrm{diag}(1, 1, -1)$ 得出；该变换是反幺正的，因此有 $S_\parallel(-\boldsymbol{k}) = S_\parallel(\boldsymbol{k})$ 和 $S_\perp(-\boldsymbol{k}) = -S_\perp(\boldsymbol{k})$。

现在，我们将这些条件应用于 17种类型。除非另有说明，Type 1 全纯群的旋转轴取为 $\hat{z}$，而 $S_\alpha(-\boldsymbol{k}) = \pm S_\alpha(\boldsymbol{k})$ 则称为偶或奇。

L.0.1. 全纯群是平凡且幺正的，并且 χ_T 是平凡的，因此平移不会导出任何约束。共线纯自旋群同时提供了两种约束：$\mathrm{SO}(2)_z$ 固定 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$，而 $\mathcal{P}R_x(\pi) = \mathrm{diag}(-1,\ 1,\ 1)$ 是反幺正的，且具有 $R_p = 1$，从而得到 $S_z(-\boldsymbol{k}) = +S_z(\boldsymbol{k})$。纹理沿自旋轴共线，且为偶。

L.0.2. 全纯群是 $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}}$，其中 $\boldsymbol{k}_\chi$ 是一个非零时间反演不变动量，因此存在某个晶格矢量满足 $\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t}_0 = \pi$，且 $\varrho_T(\boldsymbol{t}_0) = -1$ 是反幺正的；它给出 $S_z(-\boldsymbol{k}) = -S_z(\boldsymbol{k})$。纯自旋元素 $\mathcal{P}R_x(\pi)$ 也具有反幺正性，并给出 $S_z(-\boldsymbol{k}) = +S_z(\boldsymbol{k})$。因此，$\boldsymbol{S} = 0$。

P.0. 全纯群平凡，因此平移不施加任何限制。共面纯自旋元素 $U = \mathrm{diag}(1,\ 1,\ -1)$ 随即给出 S_x, S_y 为偶，S_z 为奇。三个分量都允许存在。

P.1.1. 全纯群为 $C_{2z} = \{E, R_z(\pi)\}$ 且是幺正的；$\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = R_z(\pi)\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$仅保留 $\hat{z}$，因此 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。共面纯自旋元素随即给出 $S_z(-\boldsymbol{k}) = -S_z(\boldsymbol{k})$，且为奇。

P.1.2. 对一般的 $\boldsymbol{k}$，全纯群为 $\{e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}\}$。每个元素都是绕 $\hat{z}$ 的旋转，所有此类旋转均保持 $\hat{z}$ 不变，同时旋转任意面内分量，因此同样有 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。宇称与 P.1.1 中相同，为奇。

P.2.1. 全纯群为 $D_1 = \{E, \sigma\}$，嵌入形式为 $\{E, R_x(\pi)\}$。由于 $R_x(\pi) = \mathrm{diag}(1,\ -1,\ -1)$，条件 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k}) = R_x(\pi)\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$ 强制 $S_y = S_z = 0$，仅留下沿未调制的面内轴的 S_x。共面纯自旋元素给出 $S_x(-\boldsymbol{k}) = +S_x(\boldsymbol{k})$，且为偶。

P.2.2. 全纯群为 $V_4 = \{E, R_x(\pi)\ R_y(\pi)\ R_z(\pi)\}$，且全部为幺正。$R_z(\pi)$仅固定$\hat{z}$，$R_x(\pi)$仅固定$\hat{x}$，而 $R_y(\pi)$仅固定$\hat{y}$；这三个条件共同作用后不留下任何方向，因此 $\boldsymbol{S} = 0$。

N.0.1. 全纯群和纯自旋群均为平凡且 $\chi_T = 1$，因此没有任何对称操作将不同动量处的 $\boldsymbol{S}$ 联系起来，也不限制其方向。该纹理是 $\boldsymbol{k}$的任意向量函数。

N.0.2. 全纯群的 $SO(3)$部分是平凡的，但 χ_T 是非平凡的：对于 $\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t}_0 = \pi$，元素$\varrho_T(\boldsymbol{t}_0) = -1$ 是反幺正的，从而得到 $\boldsymbol{S}(-\boldsymbol{k}) = -\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$。因此三个分量均被允许，但每个分量都是奇的。

N.1.1. 全纯群为 $\{e^{-i(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})J_z}\}$，其中 $\boldsymbol{k}$ 是一个时间反演不变动量，因此 $\{E, R_z(\pi)\}$为幺正且轴固定：$\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。由于 χ_T 是平凡的，不存在反幺正平移；而对于非共面序，纯自旋群是平凡的，因此 $S_z(\boldsymbol{k})$的宇称不受约束。

N.1.2. 与 P.1.2 中一样，全纯群由绕公共轴的旋转组成，这些旋转仅固定 $\hat{z}$，因此 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$；同样，$\chi_T$ 是平凡的，不会产生宇称约束。

N.1.3. 此处 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k}$ 是非零的时间反演不变动量，因此每个全纯群元素都是 $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t}}R_z(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})$。对于 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t} = 0$，这是恒等变换；对于 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t} = \pi$，则是 $-R_z(\pi) = \mathrm{diag}(1,\ 1,\ -1)$，它是非正旋的，因此是反幺正的。因此，酉部分是平凡的，不对方向施加任何限制；而反幺正元素则使面内分量为偶、S_z为奇。三个分量均允许。

N.1.4. 设 $\boldsymbol{k}_\chi$和 $\boldsymbol{k}$是两个不同的时间反演不变动量。幺正平移具有 $\boldsymbol{k}_\chi\cdot\boldsymbol{t} = 0$，且由于 $\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t} \in \{0, \pi\}$，其自旋操作为 E 或 $R_z(\pi)$；二者均固定 $\hat{z}$，因此 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。反幺正平移具有 $\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t} = \pi$，自旋操作为 $-R_z(\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})$，这等于 σ_z 或 -1；二者作用于 $\hat{z}$时均表现为 -1，因此 S_z 为奇。

N.1.5. 当 $\boldsymbol{k}_\chi$ 为非零时间反演不变动量且 $\boldsymbol{k}$ 为一般情形时，幺正平移再次具有 $\boldsymbol{k}_\chi \cdot \boldsymbol{t} = 0$，而自旋操作 $R_z(-\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{t})$ 的角度连续变化，其共同不变空间为 $\hat{z}$；因此 $\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。反幺正平移会使其乘以 -1，所以对 $\hat{z}$ 的作用始终是 -1，且 S_z 为奇。

N.2.1. 全纯群是 V_4 且为幺正的。与 P.2.2 一样，三个 π 旋转分别仅固定 $\hat{x}$、$\hat{y}$ 和 $\hat{z}$，因此它们的共同不变空间为空，且 $\boldsymbol{S} = 0$。

N.2.2. 取 $\boldsymbol{k}_\chi = \boldsymbol{k}_3$，使得 $\varrho_T(\boldsymbol{t}) = e^{i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}}\mathrm{diag}\left(e^{i\boldsymbol{k}_1\cdot\boldsymbol{t}},\ e^{i\boldsymbol{k}_2\cdot\boldsymbol{t}},\ e^{i\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t}}\right)$。幺正平移具有 $\boldsymbol{k}_3\cdot\boldsymbol{t} = 0$，并且由于 $\boldsymbol{k}_1 + \boldsymbol{k}_2 + \boldsymbol{k}_3 = \boldsymbol{0}$其余两个指数相同，因此 $\varrho_T \in \{E, \mathrm{diag}(-1,\ -1,\ 1)\}$且

$\boldsymbol{S} \parallel \hat{z}$。反幺正平移具有 $\boldsymbol{k}_3 \cdot \boldsymbol{t} = \pi$，这使得另外两个指数互为相反数；此时 ϱ_T 为 $\sigma_x = \mathrm{diag}(-1,\ 1,\ 1)$ 或 $\sigma_y = \mathrm{diag}(1,\ -1,\ 1)$，两者均使 z 分量保持不变，因此 S_z 为偶。

N.2.3. 全纯群包含 V_4 以及分级，其酉部分仍包含三个π 旋转。它们的共同不变空间为空，正如 N.2.1 中一样，因此 $\boldsymbol{S} = 0$。

所有类型的相应条件汇总于表 VI。

表 VI。每种自旋晶格类型的对称性所允许的动量空间自旋极化。 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$ 是式（110）中定义的完整对称性多重态上的迹。“偶”和“奇”指的是 $\boldsymbol{S}_\alpha(-\boldsymbol{k}) = \pm \boldsymbol{S}_\alpha(\boldsymbol{k})$；短横线表示 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$ 为零。该轴是 ϱ_T(T) 的共同旋转轴；对于 P.2.1，它是未调制的面内轴；对于 N.2.2，它是未调制自旋轴。

类型	允许 $\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$	宇称
L.0.1	$S_{\hat{z}}$	even
L.0.2	0	—
P.0	$S_{\hat{x}}\hat{x} + S_{\hat{y}}\hat{y} + S_{\hat{z}}\hat{z}$	(+, +, +)
P.1.1	$S_{\hat{z}}$	odd
P.1.2	$S_{\hat{z}}$	odd
P.2.1	$S_{\hat{x}}$	even
P.2.2	0	—
N.0.1	任意	none
N.0.2	任意方向	(–, –, –)
N.1.1	$S_{\hat{z}}$	none
N.1.2	$S_{\hat{z}}$	none
N.1.3	$S_{\hat{x}}\hat{x} + S_{\hat{y}}\hat{y} + S_{\hat{z}}\hat{z}$	(+, +, +)
N.1.4	$S_{\hat{z}}$	odd
N.1.5	$S_{\hat{z}}$	odd
N.2.1	0	—
N.2.2	$S_{\hat{z}}$	even
N.2.3	0	—

表六中的若干特征值得着重指出。首先，恰有四种类型的自旋纹理恒为零：L.0.2、P.2.2、N.2.1 和 N.2.3；在这四种情况下，纹理消失都是简并伙伴相互抵消的结果。对于 P.2.2、N.2.1 和 N.2.3，全纯群包含 V_4，它在 $SU(2)$中的提升为 Q_8；因此，多重态是 Q_8 双重态，而这些类型恰好是在第八 B节中具有非对易布里渊区的类型。L.0.2 的简并则源于另一种机制：反幺正平移与纯自旋元素 $\mathcal{P}R_x(\pi)$的乘积在每个 $\boldsymbol{k}$处都是幺正自旋翻转，它会使同一动量处的两种自旋取向成对，从而令迹为零。

其次，五种类型 P.1.1、P.1.2、N.0.2、N.1.4 和 N.1.5 的净磁化恒为零（表五），但自旋纹理不一定为零；因此，按照交错磁性和 p波磁学的定义，它们属于补偿型自旋分裂磁体。这一判定在此仅由平移全纯得出。

第三，在九种自旋空间共线类型中，P.2.1 与文献 [31–33]报道的共线纹理有关。其唯一允许的分量 S_x 在 $\boldsymbol{k}$中具有偶宇称，因此在整个布里渊区内，自旋纹理都严格沿未调制的面内轴共线，无需任何精细调节。上述推导展示了这一结果背后的两个条件： D_1 全纯群消除了两个正交分量，而共面纯自旋元素则确定了剩余分量的宇称。如果第二个 π 旋转 R_y（π）与平移相关联，就像 V_4 在 P.2.2 中那样，那么剩余分量也会被消除，纹理将恒为零。同样的偶宇称也出现在 N.2.2 中：

幺正平移仅留下 S_z，而反幺正元素保留该分量，因此自旋纹理再次严格共线且具有偶宇称，此时沿未调制自旋轴排列；在这种情况下，该序沿该轴具有有限的净磁化。

第四，具有一般点群元素 $\boldsymbol{S}(R_p\boldsymbol{k}) = \rho_p\boldsymbol{S}(\boldsymbol{k})$ 的方程（111）关联不同的动量，并产生特定材料的 d波、 p波或 g波各向异性；表VI给出了适用于给定自旋晶格类型的每个自旋空间群的通用部分。

九. 与其他枚举框架的关系

我们的框架与 Xiao 等人的框架之间存在直接联系。在 Xiao 等人的分类中，通过结合 G 的不可约表示来枚举 [3], 同态 $\varrho : G \to O(3)$。 ϱ 对 T 的限制是 ϱ_T，它分解为由动量 $\boldsymbol{k}$ 标记的 T 的不可约表示。Xiao 等人分类中的自旋空间群名称明确包含这些动量，这为其分类中给定自旋空间群的自旋晶格类型提供了一些信息。

我们在表 七 中列出了每种 Xiao 等人类型的所有可能自旋晶格类型。

由于只有自旋晶格类型 P.2.2、N.2.1 和 N.2.3 才能容纳非对易布里渊区，这解释了为什么在 Xiao 等人的分类中，共面自旋空间群只有类型三和七会出现非对易布里渊区，而非共面自旋空间群则只有类型九、十三和十六会出现。

X. 自旋空间数据库

我们应用本文提出的枚举算法，构建了一个自旋空间群数据库。该数据库涵盖了 230 个母空间群中的全部 67,475 个自旋空间群（58,955 个离散群和 8,520 个连续族），与 Xiao 等人的枚举结果一致。 [3]。数据库可从https://github.com/Peiyuan-Wang/SSG-database下载。

我们将平移自旋像、完整有效自旋像和诱导点群商定义为

$$H = \varrho_T(T), \qquad K = \varrho(G), \qquad Q = \varrho_P(P) = K/H,$$

其中， ϱ_T是 T上的 ϱ的限制，且 $\varrho_P(gT) = \varrho(g)H$。

在目录中，所有自旋空间群均按五个层级进行分类：

1. 母空间群： 晶体空间群 G。

2. 自旋构型： 共线（$n = 1$）、共面（$n = 2$）或非共面（$n = 3$）。

3. 自旋晶格类型： 根据 H定义的17种类型。

4. 自旋布拉菲晶格： 由 T 和 ϱ_T决定。对于固定的 G 和自旋晶格类型，自旋布拉维晶格类型可由代表旋转和平移波矢指定。

5. 自旋晶体类： 保持 Q 在 $N_{O(n)}(H)/H$中的嵌入不变的 Q 的等价类。

对于自旋晶体类这一层级，我们用一对 (Q, K) 来标记一个类。这是因为在我们的数据库中，Q 仅以抽象群的形式给出，而借助具体群 $K \in O(n)$，可以恢复嵌入信息。对于离散条目， K 是有限点群。但对于连续族，K 可以是一个

表 VII. Xiao 等人每种类型所允许的自旋晶格类型。

Type	自旋晶格类型
Collinear	
I	L.0.1
II	L.0.1 , L.0.2
Coplanar	
I	P.0
II	P.0, P.2.1
III	P.0, P.1.1 , P.2.1 , P.2.2
IV	P.0, P.1.1 , P.1.2
V	P.1.2
VI	P.0, P.1.1
VII	P.1.2 , P.2.2
VIII	P.1.2
Noncoplanar	
I	N.0.1
II	N.0.1 , N.1.3
III	N.0.1 , N.1.1 , N.1.3 , N.2.2
IV	N.0.1 , N.1.1 , N.1.2
V	N.1.2
VI	N.0.1 , N.1.1
VII	N.1.2 , N.2.2
VIII	N.1.2
IX	N.0.1 , N.0.2 , N.1.1 , N.1.3 , N.1.4 , N.2.1 , N.2.2 , N.2.3
X	N.0.1 , N.0.2 , N.1.1 , N.1.2 , N.1.3 , N.1.4 , N.1.5
XI	N.1.2 , N.1.5
XII	N.0.1 , N.0.2 , N.1.1 , N.1.3 , N.1.4
XIII	N.1.2 , N.1.5 , N.2.1 , N.2.2 , N.2.3
XIV	N.1.2 , N.1.5
XV	N.0.1 , N.0.2
XVI	N.2.1 , N.2.3

无限群，并随参数变化。对于连续族，我们用生成元来表示 K 。我们用 $r(u)$ 表示绕 z 轴旋转 $2\pi u$，用 j 表示自旋反转，用 x 表示绕 x 轴旋转 π，并用 $\sigma = (1, -1) \in O(2)$ 表示反射。例如， $K = \langle r(u_0)\ j,\ x\rangle$ 表示 K 由 $r(u_0)$ j 和 x 生成。

对于每个条目，数据库都列出了 G的三个原始平移生成元和点操作对应的塞茨操作及自旋矩阵（对于连续族，以符号形式表示），以及群论不变量（H、 K、 Q）、点操作核 ker ϱ_P、传播波矢，以及 Xiao等人 [3]目录中对应的标识符。数据库支持通过 Xiao 等人 [3]目录中的标识符搜索自旋空间群，也支持按母群、布拉菲格子、点群、自旋构型、自旋晶格类型、传播波矢、 $Q = \varrho_P(P)$、$K = \varrho(G)$ 和 $\ker\varrho_P$ 等条件搜索自旋空间群。对于连续族，还支持根据给定参数数值计算自旋矩阵。更详细的说明，请参阅帮助中的《用户指南》。

XI. 总结与展望

我们建立了一个具有清晰物理意义的自旋空间群和晶体磁序分类框架，其基础是平移全纯，即晶格平移在自旋同态下的像。借鉴空间群的 Zassenhaus 分类 [6] ，通过对平移和点群操作进行层级化处理，我们将自旋空间群归纳为三种基本平移类型和17种普适自旋-晶格类型。每种类型在动量空间和偏振空间中都呈现出独特特征，从而将抽象群论与极化中子衍射直接联系起来。

该框架具有多项实际优势。它能够回答给定母空间群允许或不允许哪些磁序，为每一种自旋晶格类型指定明确无歧义的衍射特征，并将磁结构对称性的确定归结为确定少数几个波矢和偏振，而无需在自旋空间群目录中进行搜索。与此前对自旋空间群的枚举和分类相比，该框架具有更强的物理意义、更易于理解，并且在应用中更加高效。它还能够对整类材料给出精确结论，例如精确磁化补偿的判据、非对易布里渊区的群论判据、交错正交 3Q 非共面磁序中均匀八极矩的消失（N.2.3），以及共面磁体中共线动量空间自旋纹理的对称性保护。

当前对磁序的分类基于平移全纯像 ϱ_T(T)，由此得到 17 种自旋晶格类型。然而，枚举算法在多个层级上对自旋空间群进行分类：自旋晶格类型、自旋布拉菲晶格类型、自旋晶体类和自旋算术晶体类。除自旋晶格类型外，其他层级还包含额外的物理信息。系统地纳入这些层级，应能实现更精细的磁序分类，其方式类似于点群层级对空间群布拉菲分类的细化。我们将此问题以及开发一套实用的、基于自旋空间群的中子衍射精修框架留待今后研究。

---

[1] D. B. Litvin 和 W. Opechowski，自旋群，Physica **76**，538（1974年）。[2] D. B. Litvin，自旋点群，《晶体学报A辑》**33**，279（1977年）。[3] Z. Xiao、J. Zhao、Y. Li、R. Shindou 和 Z.-D. Song，自旋空间群：完整分类与应用，《物理评论X》**14**，031037（2024年）。[4] Y. Jiang、Z. Song、T. Zhu、Z. Fang、H. Weng、Z.-X. Liu、J. Yang 和 C. Fang，自旋空间群的枚举：迈向磁序对称性的完整描述，《物理评论X》**14**，031039（2024年）。[5] X. Chen、J. Ren、Y. Zhu、Y. Yu、A. Zhang、P. Liu、J. Li、Y. Liu、C. Li 和 Q. Liu，自旋空间群的枚举与表示理论，《物理评论X》**14**，031038（2024年）。[6] H. Zassenhaus， ¨关于确定空间群的算法，《赫尔维蒂数学评论》**21**，117（1948年）。[7] C. J. Bradley 和 A. P. Cracknell， *The Mathematical Theory of Symmetry in Solids*（克拉伦登出版社，牛津，1972年）。[8] J. M. D. Coey， *Magnetism and Magnetic Materials*（剑桥大学出版社，剑桥，2010年）。[9] L. ˇSmejkal、J. Sinova 和 T. Jungwirth，超越传统铁磁性与反铁磁性：一种具有非相对论自旋和晶体旋转对称性的相，《物理评论X》**12**，031042（2022年）。[10] W. L. Roth，MnO、FeO、CoO和NiO的磁结构，《物理评论》**110**，1333（1958年）。[11] S. Nakatsuji、N. Kiyohara 和 T. Higo，室温下非共线反铁磁体中的巨大反常霍尔效应，《自然》**527**，212（2015年）。[12] J. J. Cederholm、Z. Xu、Y. Guo、M. Ovesen、T. Olsen、K. M. L. Krighaar、C. Knekna、J. R. Soh、Y. Lee、N。

Qureshi、J. A. Rodriguez Velamazan、E. Ressouche、A. T. Boothroyd 和 H. Jacobsen，《Mn_3Sn 的基态磁结构》，《物理评论B》113，174437（2026年）。[13] J.-R. Soh、F. de Juan、N. Qureshi、H. Jacobsen、H.-Y. Wang、Y.-F. Guo 和 A. T. Boothroyd，《Mn_3Ge 的基态磁结构》，《物理评论B》101，140411(R)（2020年）。[14] H. Sim、J. Oh、J. Jeong、M. D. Le 和 J.-G. Park，《六方 $RMnO_3$：二维三角晶格反铁磁体的模型系统》，《晶体学报B辑》72，3（2016年）。[15] I. Sosnowska、T. P. Neumaier 和 E. Steichele，《铁酸铋中的螺旋磁有序》，《物理学杂志C：固体物理》15，4835（1982年）。[16]M. Ramazanoglu、W. Ratcliff、Y. Choi、S. Lee、S.-W. Cheong 和 V. Kiryukhin，《单晶 $BiFeO_3$, 中磁序的温度依赖性质》，《物理评论B》83，174434（2011年）。[17] J. Jensen 和 A. R. Mackintosh，*Rare Earth Magnetism: Structures and Excitations*（克拉伦登出版社，牛津，1991年）。[18] D. Gibbs、D. E. Moncton、K. L. D'Amico、J. Bohr 和 B. H. Grier，《利用同步辐射研究钬的磁性X射线散射》，《物理评论快报》55，234（1985年）。[19]N. F. Oliveira, Jr.、S. Foner、Y. Shapira 和 T. B. Reed，《EuTe：I. 绝缘和导电单晶的磁行为》，《物理评论B》5，2634（1972年）。[20] W. R. Meier、Q.-P. Ding、A. Kreyssig、S. L. Bud'ko、A. Sapkota、K. Kothapalli、V. Borisov、R. Valent´ı、C. D. Batista、P. P. Orth、R. M. Fernandes、A. I. Goldman、Y. Furukawa、A. E. B¨ohmer 和 P. C. Canfield，《空穴掺杂铁基超导体中稳定的刺猬型自旋涡旋晶体》，《npj量子材料》3，5（2018年）。[21] E. E. McCabe、C. Stock、E. E. Rodriguez、A. S. Wills、J. W. Taylor 和 J. S. O. Evans，《莫特绝缘体 $La_2O_2Fe_2OSe_2$, 中的弱自旋相互作用》，《物理评论B》89，100402（2014年）。[22] H. Sagayama、D. Uematsu、T. Arima、K. Sugimoto、J. J. Ishikawa、E. O'Farrell 和 S. Nakatsuji，《通过共振X射线衍射确定烧绿石铱氧化物 $Eu_2Ir_2O_7$ 中 Ir^{4+} 磁矩的长程全进全出有序》，《物理评论B》87，100403(R)（2013年）。[23] H. Guo、C. Ritter 和 A. C. Komarek，《通过中子衍射直接确定 $Nd_2Ir_2O_7$ 的自旋结构》，《物理评论B》94，161102(R)（2016年）。[24] T. Inami、M. Nishiyama、S. Maegawa 和 Y. Oka，《kagom´e 晶格反铁磁体钾黄钾铁矾 $KFe_3(OH)_6(SO_4)_2$, 的磁结构》，《物理评论B》61，12181（2000年）。[25] B. M. Bartlett 和 D. G. Nocera，《通过氧化还原水热法制备的铁黄钾铁矾中的长程磁有序》，《美国化学会志》127，8985（2005年）。[26] Y. Ishikawa、K. Tajima、D. Bloch 和 M. Roth，《硅化锰 MnSi 中的螺旋自旋结构》，《固体通讯》19，525（1976年）。[27] B. Lebech、J. Bernhard 和 T. Freltoft，《通过小角中子散射研究立方 FeGe 的磁结构》，《物理学杂志：凝聚态物质》1，6105（1989年）。[28] R. Laskowski、G. K. H. Madsen、P. Blaha 和 K. Schwarz，《二氧化铀的磁结构和电场梯度：第一性原理研究》，《物理评论B》69，140408(R)（2004年）。[29] J. Rossat-Mignod、P. Burlet、S. Quezel 和 O. Vogt，《铈和铀单 pnictide 化合物中的磁有序》，《物理学B辑》102，237（1980年）。[30] E. F. Bertaut，《磁结构的表示分析》，《晶体学报A辑》24，217（1968年）。[31] A. B. Hellenes、T. Jungwirth、R. Jaeschke-Ubiergo、A. Chakraborty、J. Sinova 和 L. ˇSmejkal，《P波磁体》，arXiv:2309.01607（2023年）。[32]X.-J. Luo、J.-X. Hu、M.-L. Hu 和 K. T. Law，《奇宇称磁体的自旋群对称性判据》，arXiv:2510.05512。[33] Z. Song、Z. Qi、C. Fang、Z. Fang 和 H. Weng，《通过自旋空间群统一分类磁序：共面偶波相的预测》，《物理评论X》16，031038（2026年）。