Циклические группы, генераторы. Если в группе G имеется такой элемент g, что его степени g^l исчерпывают все элементы группы, т. е.

$$G = \{g,\ g^2, \ldots, g^l, \ldots, g^n = e\}, \tag{32}$$

то такая группа называется циклической и порядок ее равен n. Таковы все группы симметрии поворотов на $2\pi/n$, обозначаемые C_n. Такой элемент g_i, степенями которого являются другие элементы группы, называется порождающим элементом, или генератором. Если группа не является циклической, то в ней можно выделить несколько элементов, степени и произведения которых дают все n элементов группы G.

Задание группы таблицей умножения наглядно, но избыточно. Пользуясь порождающими элементами и задав определяющие соотношения между ними, мы также получим полное описание группы. Для группы 32 генераторами могут служить g_1 и любой из g_3, g_4, g_5, определяющие соотношения таковы (ср. с (30)):

$$g_1^3 = g_3^2 = (g_1 g_3)^2 = e. \tag{33}$$

Важным разделением кристаллографических групп K является разделение на семь сингоний. В основе этого разделения лежит признак точечной симметрии пространственной решетки кристалла, которая проявляется в симметрии элементарного параллелепипеда и выражается в определенных соотношениях между его периодами и углами. Разделение групп K по этому признаку характеризуется тем, что рассматриваемая симметрия — кристаллографическая, определяемая наличием у кристаллов пространственной решетки. Ниже, в § 8, мы будем подробно рассматривать симметрию решетки и разделение на сингонии, а сейчас их только охарактеризуем.

Характеристики сингоний и распределение по ним групп K даны в табл. 3 и 5. В случае триклинной сингонии все периоды не равны друг другу: $a \neq \beta \neq c$, и углы между осями $\alpha \neq \beta \neq \gamma$ также отличаются друг от друга; в высшей, кубической сингонии $a = b = c$, $\alpha = \beta = \gamma = 90^\circ$. Остальные случаи — гексагональной, тригональной (ее называли и ромбоэдрической), тетрагональной, ромбической и моноклинной сингоний — промежуточные и характеризуются значениями всех или некоторых углов 90° (или 60°) и равенством всех или некоторых периодов между собой.

Группы K — это группы симметрии внешней формы (огранки) кристаллов. Они, а значит и сингония кристаллов, могут быть найдены из измерений внешней формы; конечно, это можно сделать и рентгенографически. Все группы K, принадлежащие к данной сингонии, являются подгруппой высшей группы, характеризующей сингонию. Такая группа называется голоэдрической — это название происходит из рассмотрения огранки кристаллов (см. гл. III, § 1) и означает «полногранная».

Точечные группы симметрии описывают не только внешнюю форму кристаллов, но и их свойства. Для данного кристалла точечные группы огранки и различных свойств могут быть разными, но они связаны между собой таким образом, что все являются подгруппой предельной группы данного семейства и сама эта предельная группа может описывать какие-нибудь свойства, а группа K внешней формы является наинизшей в этой совокупности. Такое проявление разной, но соподчиненной точечной симметрии кристалла в различных его физических свойствах называют принципом максимальной и минимальной симметрии (см. т. 4).

6.6. Представления точечных групп K. В § 3 мы выяснили, что группа G может быть представлена изоморфной ей (28) или гомоморфной ей (31) группой H, элементы которой могут быть числами, матрицами и т. п.

Точное (изоморфное) представление групп K дают матрицы $D(g)$ (6) преобразований координат, соответствующие данной операции $g \in K$. Совокупность таких матриц образует точное векторное представление (размерности 3) соответствующей группы, таблица умножения этих матриц по правилам матричного умножения (45) соответствует таблице умножения элементов g_i. (Матрицы порождающих операций даны в табл. 5.)

Например, для группы $K = 2/m$ векторное представление D при специальном выборе осей X_1, X_2, X_3 (табл. 5) имеет вид:

$$2/m \quad = \{ \quad 1, \qquad 2, \qquad \bar{1}, \qquad m \quad \}, \tag{76}$$

$$\updownarrow$$

$$D(2/m) = \left\{ \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix}, \begin{Vmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{Vmatrix} \right\}, \tag{77}$$

Нетрудно убедиться, что, например, умножению $2\bar{1} = m$ отвечает умножение соответствующих матриц из (77).

Из такого рода векторных представлений группы K, если перейти к другим ортогональным осям X_1^*, X_2^*, X_3^* с помощью неособенного преобразования S, можно получить другие эквивалентные представления той же группы $D^*(g) = SD(g)S^{-1}$. Но для всех эквивалентных представлений сохраняется след матрицы — характер представления $\chi(g)$ (51).

Так, характеры элементов $\chi(g)$ группы $2/m$ во всех векторных ортогонально-эквивалентных представлениях $D(G)$ равны

$$\chi(g) = \{\chi(1) = 3,\ \chi(2) = -1,\ \chi(\bar{1}) = -3,\ \chi(m) = 1\}. \tag{78}$$

Из векторных представлений групп K по определенным правилам можно получить тензорные представления степени $3^2, \ldots, 3^s$, что важно для анализа физических свойств кристаллов, описываемых тензорами различных рангов. При этом соответствующие матрицы $D^2, \ldots, D^s$ перемножаются по правилам тензорного умножения.