ГЛАВА XII

ТЕОРИЯ СИММЕТРИИ

§ 91. Преобразования симметрии

Классификация термов многоатомной молекулы существенно связана, как и у двухатомной молекулы, с ее симметрией. Поэтому мы начинаем с изучения типов симметрии, которыми может обладать молекула.

Симметрия тела определяется совокупностью тех перемещений, которые совмещают тело с самим собой; об этих перемещениях говорят, как о *преобразованиях симметрии*. Каждое из возможных преобразований симметрии можно представить в виде комбинации одного или нескольких из трех основных типов преобразований. Этими тремя существенно различными типами являются: *поворот* тела на определенный угол вокруг некоторой оси, *зеркальное отражение* в некоторой плоскости и *параллельный перенос* тела на некоторое расстояние. Из них последним типом может обладать, очевидно, только неограниченная среда (кристаллическая решетка). Тело же конечных размеров (в частности, молекула) может быть симметрично только по отношению к поворотам и отражениям.

Если тело совмещается само с собой при повороте вокруг некоторой оси на угол $2\pi/n$, то такая ось называется *осью симметрии* n*-го порядка*. Число n может иметь любое целое значение: $n = 2, 3, \ldots$; значение $n = 1$ соответствует повороту на угол 2π или, что то же, на 0, т. е. соответствует тождественному преобразованию. Операцию поворота вокруг данной оси на угол $2\pi/n$ мы будем обозначать символически посредством C_n. Повторяя эту операцию два, три, ... раза, мы получим повороты на углы $2(2\pi/n)$, $3(2\pi/n)$, ..., которые тоже совмещают тело с самим собой; эти повороты можно обозначать как C_n^2, C_n^3, ... Очевидно, что если n кратно p, то

$$C_n^p = C_{n/p}. \tag{91,1}$$

В частности, произведя поворот n раз, мы вернемся в исходное положение, т. е. произведем *тождественное преобразование*; последнее принято обозначать посредством E, т. е. можно написать

$$C_n^n = E. \tag{91,2}$$

Если тело совмещается с самим собой при зеркальном отражении в некоторой плоскости, то такая плоскость называется *плоскостью симметрии*. Операцию отражения в плоскости мы будем обозначать символом σ. Очевидно, что двукратное отражение в одной плоскости есть тождественное преобразование

$$\sigma^2 = E. \tag{91,3}$$

Одновременное применение обоих преобразований — поворота и отражения — приводит к так называемым *зеркально-поворотным осям*. Тело обладает зеркально-поворотной осью n-го порядка, если оно совмещается с самим собой при повороте вокруг этой оси на угол $2\pi/n$ и последующем отражении в плоскости, перпендикулярной к оси (рис. 32). Легко сообразить, что это есть некоторый новый вид симметрии только в том случае, если n — четное число. Действительно, если n — нечетное число, то n-кратное повторение зеркально-поворотного преобразования будет равносильно простому отражению в плоскости, перпендикулярной к оси (поскольку угол поворота будет равен 2π, а нечетное число отражений в одной и той же плоскости есть простое отражение). Повторяя это преобразование еще n раз, найдем в результате, что зеркально-поворотная ось сводится к одновременному наличию независимых оси симметрии n-го порядка и перпендикулярной к ней плоскости симметрии. Если же n — четное число, то n-кратное повторение зеркально-поворотного преобразования возвращает тело в исходное положение.

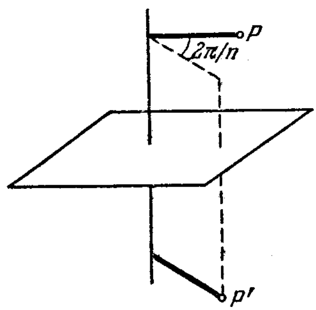

Рис. 32

Зеркально-поворотное преобразование обозначаем символом S_n. Обозначая отражение в плоскости, перпендикулярной к данной оси, посредством σ_h, можем написать, по определению

$$S_n = C_n\sigma_h = \sigma_h C_n \tag{91,4}$$

(порядок, в котором производятся операции C_n и σ_h, очевидно, не влияет на результат).

Важным частным случаем является зеркально-поворотная ось второго порядка. Легко сообразить, что поворот на угол π с последующим отражением в плоскости, перпендикулярной к оси вращения, представляет собой преобразование *инверсии*, при котором точка P тела переводится в другую точку P', лежащую на продолжении прямой, соединяющей P с точкой O пересечения оси с плоскостью, так что расстояния OP и OP' одинаковы. О теле, симметричном относительно этого преобразования, говорят, что оно обладает центром симметрии. Операцию инверсии мы будем обозначать символом I; имеем

$$I \equiv S_2 = C_2\sigma_h. \qquad (91,5)$$

Очевидно также, что $I\sigma_h = C_2$, $IC_2 = \sigma_h$; другими словами, ось второго порядка, перпендикулярная к ней плоскость симметрии и центр симметрии в точке их пересечения взаимно зависимы — наличие любых двух из этих элементов автоматически приводит к наличию также и третьего.

Укажем здесь ряд чисто геометрических свойств, присущих поворотам и отражениям, которые полезно иметь в виду при изучении симметрии тел.

Произведение двух поворотов вокруг осей, пересекающихся в некоторой точке, есть поворот вокруг некоторой третьей оси, проходящей через ту же точку. Произведение двух отражений в пересекающихся друг с другом плоскостях эквивалентно повороту; ось этого поворота, очевидно, совпадает с линией пересечения плоскостей, а угол поворота равен, как легко убедиться простым геометрическим построением, удвоенному углу между обеими плоскостями. Если обозначить поворот вокруг оси на угол φ посредством $C(\varphi)$, а отражения в двух плоскостях, проходящих через ось, символами σ_v и σ_v' [1]), то высказанное утверждение можно записать в виде

$$\sigma_v\sigma_v' = C(2\varphi), \qquad (91,6)$$

где φ — угол между обеими плоскостями. Необходимо отметить, что порядок, в котором производятся оба отражения, не безразличен: преобразование $\sigma_v\sigma_v'$ дает поворот в направлении от плоскости σ_v' к σ_v, а при перестановке множителей мы получим поворот в обратном направлении. Умножая равенство (91,6) слева на σ_v, получим

$$\sigma_v' = \sigma_v C(2\varphi); \qquad (91,7)$$

другими словами, произведение поворота и отражения в плоскости, проходящей через ось, эквивалентно отражению в другой плоскости, пересекающейся с первой под углом, равным половине угла поворота. В частности, отсюда следует, что ось симметрии второго порядка и две проходящие через нее взаимно перпендикулярные плоскости симметрии взаимно зависимы: наличие двух из них требует также наличия третьей.

Покажем, что произведение поворотов на угол π вокруг двух пересекающихся под углом φ осей (Oa и Ob на рис. 33) есть пово-

---

[1]) Индексом v обычно отличают отражение в плоскости, проходящей через данную ось («вертикальная» плоскость), а индексом h — в плоскости, перпендикулярной к оси («горизонтальная» плоскость).

рот на угол 2φ вокруг оси, перпендикулярной к первым двум (PP' на рис. 33). Действительно, заранее ясно, что результирующее преобразование есть тоже поворот; после первого поворота (вокруг Oa) точка P переходит в P', а после второго (вокруг Ob) она возвращается в исходное положение. Это значит, что линия PP' остается неподвижной и, следовательно, является осью поворота. Для определения угла поворота достаточно заметить, что при первом повороте ось Oa остается на месте, а после второго переходит в положение Oa', образующее с Oa угол 2φ. Таким же способом можно убедиться в том, что при перемене порядка обоих преобразований мы получим поворот в противоположном направлении.

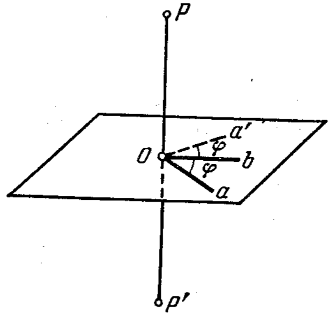

Рис. 33

Хотя результат двух последовательных преобразований зависит, вообще говоря, от порядка, в котором они производятся, но в ряде случаев порядок операций несуществен — преобразования коммутативны. Это имеет место для следующих преобразований:

1) два поворота вокруг одной и той же оси;

2) два отражения во взаимно перпендикулярных плоскостях (они эквивалентны повороту на угол π вокруг линии пересечения плоскостей);

3) два поворота на угол π вокруг взаимно перпендикулярных осей (они эквивалентны повороту на тот же угол вокруг третьей перпендикулярной оси);

4) поворот и отражение в плоскости, перпендикулярной к оси поворота;

5) любой поворот (или отражение) и инверсия в точке, лежащей на оси вращения (или в плоскости отражения); это следует из 1 и 4.

§ 92. Группы преобразований

Совокупность всех преобразований симметрии данного тела называют его группой преобразований симметрии, или просто *группой симметрии*. Выше мы говорили об этих преобразованиях, как о геометрических перемещениях тела. В квантовомеханических применениях удобнее, однако, рассматривать преобразования симметрии как преобразования координат, оставляющие инвариантным гамильтониан данной системы. Очевидно, что если система совмещается сама с собой при некотором повороте или отражении, то соответствующее преобразование координат не