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.

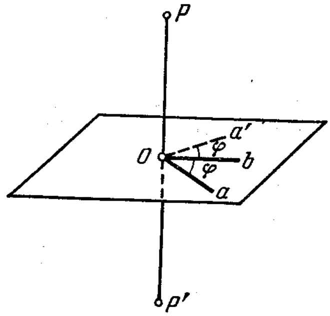

Рис. 33

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 изменит ее уравнения Шредингера. Таким образом, мы будем говорить о группе преобразований, по отношению к которым инвариантно данное уравнение Шредингера [1]).

Изучение групп симметрии удобно производить с помощью общего математического аппарата так называемой *теории групп*, основы которого излагаются ниже. Мы будем рассматривать сначала группы, каждая из которых содержит конечное число различных преобразований (так называемые *конечные группы*). О каждом из преобразований, входящих в состав группы, говорят, как об *элементе группы*.

Группы симметрии обладают следующими очевидными свойствами. В состав всякой группы входит тождественное преобразование E (о нем говорят, как о *единичном элементе группы*). Элементы группы можно *перемножать* друг с другом; под произведением двух (или нескольких) преобразований подразумевается результат их последовательного применения. Очевидно, что произведение всяких двух элементов группы есть элемент той же группы. Для умножения элементов имеет место закон ассоциативности $(AB)\,C = A\,(BC)$, где A, B, C — элементы группы. Закон коммутативности, однако, не имеет, вообще говоря, места; в общем случае $AB \neq BA$. Для каждого элемента группы A имеется в той же группе *обратный* элемент A^{-1} (обратное преобразование) такой, что $AA^{-1} = E$. В некоторых случаях элемент может совпадать со своим обратным, в частности, $E^{-1} = E$. Очевидно, что взаимно обратные элементы A и A^{-1} коммутативны.

Элемент, обратный произведению AB двух элементов, равен

$$(AB)^{-1} = B^{-1}A^{-1}$$

и аналогично для произведения большего числа элементов; в этом

---

[1]) Такая точка зрения позволяет включить в рассмотрение не только группы поворотов и отражений, о которых идет здесь речь, но и другие типы преобразований, оставляющих неизменным уравнение Шредингера. К ним относятся перестановки координат тождественных частиц, входящих в состав данной системы (молекулы или атома). О совокупности всех возможных в данной системе перестановок тождественных частиц говорят, как о ее *группе перестановок* (мы имели уже с ними дело в § 63). Излагаемые ниже общие свойства групп относятся и к группам перестановок; более подробным изучением этого вида групп мы не станем заниматься.

По поводу применяемых в этой главе обозначений надо сделать следующее замечание. Преобразования симметрии представляют собой по существу такие же операторы, какие мы рассматриваем на протяжении всей книги, и их следовало бы обозначать буквами со шляпками. Мы не делаем этого, имея в виду общепринятые обозначения, а также учитывая, что это не может привести в настоящей главе к недоразумениям. По той же причине мы пользуемся для обозначения тождественного преобразования общепринятым символом E, а не 1, как это соответствовало бы обозначениям в остальных главах. Наконец, оператор инверсии обозначается в этой главе символом I вместо использованного в § 30 символа P, принятого в современной литературе по квантовой механике.

легко убедиться, производя перемножение и используя закон ассоциативности.

Если все элементы группы коммутативны, то такая группа называется *абелевой*. Частным случаем абелевых являются так называемые *циклические группы*. Под циклической понимают группу, все элементы которой могут быть получены путем возведения одного из них в последовательные степени, т. е. группу, состоящую из элементов

$$A,\ A^2,\ A^3,\ \ldots,\ A^n = E,$$

где n есть некоторое целое число.

Пусть $\boldsymbol{G}$ есть некоторая группа [1]). Если из нее можно выделить некоторую совокупность элементов $\boldsymbol{H}$ такую, что она сама тоже будет составлять группу, то группу $\boldsymbol{H}$ называют *подгруппой* группы $\boldsymbol{G}$. Один и тот же элемент группы может входить в различные ее подгруппы.

Взяв любой элемент A группы и возводя его в последовательные степени, мы получим в конце концов единичный элемент (поскольку полное число элементов в группе конечно). Если n есть наименьшее число, при котором $A^n = E$, то n называется *порядком элемента* A, а совокупность элементов $A, A^2, \ldots, A^n = E$ — *периодом* A. Период обозначают посредством $\{A\}$; он составляет сам по себе группу, т. е. является подгруппой исходной группы, причем подгруппой циклической.

Для того чтобы проверить, является ли данная совокупность элементов группы ее подгруппой, достаточно убедиться в том, что при умножении всяких двух ее элементов получается элемент, содержащийся в той же совокупности. Действительно, тогда вместе со всяким элементом A будут иметься и все его степени, в том числе A^{n-1} (n — порядок элемента), играющий роль обратного (так как $A^{n-1}A = A^n = E$); будет иметься, очевидно, и единичный элемент.

Полное число элементов группы называют ее *порядком*. Легко видеть, что порядок подгруппы есть делитель порядка всей группы. Для этого рассмотрим подгруппу $\boldsymbol{H}$ группы $\boldsymbol{G}$, и пусть G_1 есть некоторый элемент группы $\boldsymbol{G}$, не принадлежащий $\boldsymbol{H}$. Умножая все элементы $\boldsymbol{H}$ на G_1 (например, справа), мы получим совокупность (или, как говорят, комплекс) элементов, обозначаемый как $\boldsymbol{H}G_1$. Все элементы этого комплекса принадлежат, очевидно, группе $\boldsymbol{G}$. Однако ни один из них не принадлежит $\boldsymbol{H}$; действительно, если бы для каких-либо двух элементов H_a, H_b, принадлежащих $\boldsymbol{H}$, было $H_aG_1 = H_b$, то отсюда следовало бы $G_1 = H_a^{-1}H_b$, т. е. G_1 тоже принадлежало бы подгруппе $\boldsymbol{H}$ в про-

[1]) Мы будем символически обозначать группы курсивными жирными буквами.

тиворечии с предположением. Аналогично можно показать, что если G_2 есть элемент группы G, не принадлежащий ни H, ни HG_1, то все элементы комплекса HG_2 не будут принадлежать ни H, ни HG_1. Продолжая этот процесс, мы в конце концов исчерпаем весь запас элементов конечной группы G. Таким образом все элементы окажутся разбитыми по множествам (называемым *смежными классами* H в G)

$$H,\ HG_1,\ HG_2,\ \ldots,\ HG_m,$$

каждое из которых содержит по h элементов, где h — порядок подгруппы H. Отсюда следует, что порядок группы G равен $g = hm$, чем и доказывается сделанное утверждение. Целое число $m = g/h$ называют *индексом* подгруппы H в группе G.

Если порядок группы есть простое число, то из доказанного непосредственно следует, что такая группа вообще не обладает никакими подгруппами (за исключением E и самой себя). Справедливо и обратное утверждение: всякая группа, не имеющая подгрупп, непременно простого порядка и к тому же должна быть циклической (в противном случае она содержала бы элементы, период которых составлял бы подгруппу).

Введем важное понятие о *сопряженных элементах*. Два элемента A и B называются сопряженными друг с другом, если

$$A = CBC^{-1},$$

где C есть тоже элемент группы (умножив написанное равенство справа на C и слева на C^{-1}, получим обратное равенство $B = C^{-1}AC$). Существенным свойством сопряженности является то, что если A сопряжено с B, а B с C, то и A сопряжено с C; действительно, из $B = P^{-1}AP$, $C = Q^{-1}BQ$ (где P, Q — элементы группы) следует, что $C = (PQ)^{-1}A(PQ)$ По этой причине можно говорить о совокупности элементов группы, сопряженных друг с другом. Такие совокупности называются *классами сопряженных элементов* или просто классами группы. Каждый класс вполне определяется одним каким-либо своим элементом A; действительно, задав A, мы получим весь класс, составляя произведения GAG^{-1}, где G пробегает все элементы группы (при этом, конечно, каждый элемент класса может получиться и по нескольку раз). Таким образом, мы можем разбить всю группу на классы; каждый элемент группы может входить, очевидно, только в один из классов. Единичный элемент группы сам по себе составляет класс, так как для всякого элемента группы $GEG^{-1} = E$. Если группа абелева, то то же самое имеет место для каждого ее элемента; поскольку все элементы такой группы, по определению, коммутативны, то каждый элемент сопряжен только самому себе и потому сам по себе составляет класс. Подчеркнем, что класс группы (не совпадающий с E) отнюдь не является ее подгруппой; это видно уже из того, что он не содержит единичного элемента.

Все элементы одного и того же класса имеют одинаковый порядок. Действительно, если n есть порядок элемента A (так что $A^n = E$), то и для сопряженного с ним элемента $B = CAC^{-1}$ имеет место $(CAC^{-1})^n = CA^nC^{-1} = E$.

Пусть $\boldsymbol{H}$ есть подгруппа $\boldsymbol{G}$, а G_1 — элемент $\boldsymbol{G}$, не принадлежащий $\boldsymbol{H}$. Легко убедиться в том, что совокупность элементов $G_1\boldsymbol{H}G_1^{-1}$ удовлетворяет всем требуемым для группы свойствам, т. е. тоже есть подгруппа группы $\boldsymbol{G}$. Подгруппы $\boldsymbol{H}$ и $G_1\boldsymbol{H}G_1^{-1}$ называются сопряженными; каждый элемент одной из них сопряжен одному из элементов другой. Давая G_1 различные значения, мы получим ряд сопряженных подгрупп, которые могут оказаться частично совпадающими друг с другом. Может случиться, что все сопряженные с $\boldsymbol{H}$ подгруппы совпадают с $\boldsymbol{H}$. В таком случае $\boldsymbol{H}$ называют *нормальным делителем* (или *инвариантной подгруппой*) группы $\boldsymbol{G}$. Так, например, всякая подгруппа абелевой группы является, очевидно, ее нормальным делителем.

Рассмотрим группу $\boldsymbol{A}$ с n элементами A, A', A'', ... и группу $\boldsymbol{B}$ с m элементами B, B', B'', ..., и пусть все элементы $\boldsymbol{A}$ (кроме единичного E) отличны от элементов $\boldsymbol{B}$ и коммутативны с ними. Если перемножить каждый элемент группы $\boldsymbol{A}$ с каждым элементом группы $\boldsymbol{B}$, то мы получим совокупность nm элементов, которые тоже составляют группу. Действительно, для всяких двух элементов этой совокупности имеем $AB \cdot A'B' = AA' \cdot BB' = A''B''$, т. е. опять элемент той же совокупности. Получившуюся группу порядка nm обозначают посредством $\boldsymbol{A} \times \boldsymbol{B}$ и называют *прямым произведением* групп $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$.

Наконец, введем понятие *изоморфизма* групп. Две группы $\boldsymbol{A}$ и $\boldsymbol{B}$ одинакового порядка называются изоморфными, если между их элементами можно установить взаимно однозначное соответствие такое, что если элементу A соответствует элемент B, а элементу A' — элемент B', то элементу $A'' = AA'$ соответствует элемент $B'' = BB'$. Такие две группы, рассматриваемые абстрактно, обладают, очевидно, тождественными свойствами, хотя конкретный смысл их элементов различен.

§ 93. Точечные группы

Преобразования, входящие в состав группы симметрии тела конечных размеров (в частности, молекулы), должны быть такими, чтобы по крайней мере одна точка тела оставалась неподвижной при применении любого из этих преобразований. Другими словами, все оси и плоскости симметрии молекулы должны иметь по крайней мере одну общую точку пересечения. Действительно, последовательный поворот тела вокруг двух непересекающихся осей или отражение в непересекающихся плоскостях приводит к поступательному перемещению тела, которое, очевидно,