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 $A, A', A'', \ldots$ и группу $\boldsymbol{B}$ с m элементами $B, B', B'', \ldots$, 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, не может совместить его с самим собой. Группы симметрии, обладающие указанным свойством, называются *точечными группами.*

Перед тем как перейти к построению возможных типов точечных групп, изложим простой геометрический способ, позволяющий легко произвести распределение элементов группы по классам. Пусть Oa есть некоторая ось, а элемент группы A есть поворот вокруг этой оси на определенный угол. Пусть, далее, G есть преобразование из той же группы (поворот или отражение), которое, будучи применено к самой оси Oa, переводит ее в положение Ob. Покажем, что элемент $B = GAG^{-1}$ отвечает тогда повороту вокруг оси Ob на тот же угол, на который элемент A поворачивает вокруг Oa. Действительно, рассмотрим воздействие преобразования GAG^{-1} на саму ось Ob. Преобразование G^{-1}, обратное G, переводит ось Ob в положение Oa, так что последующий поворот A оставляет ее в этом положении; наконец, G переведет ее обратно в исходное положение. Таким образом, ось Ob остается в результате на месте, так что B есть поворот вокруг этой оси. Поскольку A и B относятся к одному классу, то порядок этих элементов одинаков; это значит, что они производят поворот на одинаковый угол.

Таким образом, мы приходим к результату, что два поворота на одинаковый угол относятся к одному классу, если в числе элементов группы имеется преобразование, с помощью которого можно совместить одну ось поворота с другой. Точно таким же образом можно показать, что и два отражения в различных плоскостях относятся к одному классу, если какое-либо преобразование группы переводит одну плоскость в другую. О самих осях или плоскостях симметрии, направления которых могут быть совмещены друг с другом, говорят как об *эквивалентных.*

Некоторые дополнительные замечания требуются для случая, когда оба поворота производятся вокруг одной и той же оси. Элементом, обратным повороту C_n^k ($k = 1, 2, \ldots, n - 1$) вокруг оси симметрии n-го порядка, является элемент $C_n^{-k} = C_n^{n-k}$, т. е. поворот на угол $(n - k)(2\pi/n)$ в том же направлении, или, что то же, поворот на угол $2k\pi/n$ в обратном направлении. Если в числе преобразований группы имеется поворот на угол π вокруг перпендикулярной оси (такой поворот меняет направление рассматриваемой оси на противоположное), то, согласно доказанному общему правилу, повороты C_n^k и C_n^{-k} будут относиться к одному классу. Отражение σ_h в плоскости, перпендикулярной к оси, тоже меняет ее направление на обратное; однако надо иметь в виду, что отражение меняет также и направление вращения. Поэтому наличие σ_h не сделает элементы C_n^k и C_n^{-k} сопряженными. Отражение же σ_v в плоскости, проходящей через ось, не меняет направления оси, но меняет направление вращения, и потому

$C_n^{-k} = \sigma_v C_n^k \sigma_v$, так что при наличии такой плоскости симметрии C_n^k и C_n^{-k} относятся к одному классу. Если повороты вокруг оси на одинаковый угол в противоположных направлениях сопряжены, то мы будем называть ось *двухсторонней*.

Определение классов точечной группы часто облегчается следующим правилом. Пусть G есть некоторая группа, не содержащая инверсии I, а C_i — группа из двух элементов: I и E. Тогда прямое произведение $G \times C_i$ есть группа, содержащая вдвое больше элементов, чем G; половина из них совпадает с элементами группы G, а остальные получаются умножением последних на I. Поскольку I коммутирует с любым другим преобразованием точечной группы, то ясно, что группа $G \times C_i$ содержит вдвое больше классов, чем G; каждому классу A группы G соответствуют в группе $G \times C_i$ два класса: A и AI. В частности, инверсия I всегда составляет сама по себе класс.

Перейдем теперь к перечислению всех возможных точечных групп. Мы будем строить их, начиная от простейших и прибавляя к ним новые элементы симметрии. Точечные группы будем обозначать жирными латинскими буквами с соответствующими индексами.

I. Группы $\boldsymbol{C}_n$

Простейший тип симметрии содержит всего одну ось симметрии n-го порядка. Группа $\boldsymbol{C}_n$ есть группа поворотов вокруг оси n-го порядка. Эта группа, очевидно, циклическая. Каждый из ее n элементов составляет сам по себе класс. Группа $\boldsymbol{C}_1$ содержит только тождественное преобразование E и соответствует отсутствию какой бы то ни было симметрии.

II. Группы $\boldsymbol{S}_{2n}$

Это — группа поворотов вокруг зеркально-поворотной оси четного порядка $2n$. Она содержит $2n$ элементов и является, очевидно, циклической. В частности, группа $\boldsymbol{S}_2$ содержит всего два элемента: E и I; ее обозначают также посредством $\boldsymbol{C}_i$. Отметим также, что если порядок группы есть число вида $2n = 4p + 2$, то среди ее элементов имеется инверсия; очевидно, что $(S_{4p+2})^{2p+1} = C_2\sigma_h = I$. Такую группу можно написать в виде прямого произведения: $\boldsymbol{S}_{4p+2} = \boldsymbol{C}_{2p+1} \times \boldsymbol{C}_i$: ее обозначают также и посредством $\boldsymbol{C}_{2p+1,\,i}$.

III. Группы $\boldsymbol{C}_{nh}$

Эти группы получаются присоединением к оси симметрии n-го порядка перпендикулярной к ней плоскости симметрии. Группа $\boldsymbol{C}_{nh}$ содержит $2n$ элементов: n поворотов группы $\boldsymbol{C}_n$ и n зеркально-поворотных преобразований $C_n^k\sigma_h$ ($k = 1, 2, \ldots, n$) (в том числе отражение $C_n^n\sigma_h = \sigma_h$). Все элементы группы коммутативны, т. е. группа абелева; число классов равно числу элементов. Если n — четно ($n = 2p$), то группа содержит центр симметрии (так как $C_{2p}^p\sigma_h = C_2\sigma_h = I$). Простейшая группа C_{1h} содержит всего два элемента: E и σ_h; ее обозначают также посредством C_s.

IV. Группы C_{nv}

Если присоединить к оси симметрии n-го порядка проходящую через нее плоскость симметрии, то это автоматически приведет к появлению еще (n — 1) плоскостей, пересекающихся друг с другом вдоль оси под углами π/n (это следует непосредственно из геометрической теоремы (91,7) [1]). Получающаяся при этом группа C_{nv} содержит, следовательно, $2n$ элементов: n поворотов вокруг

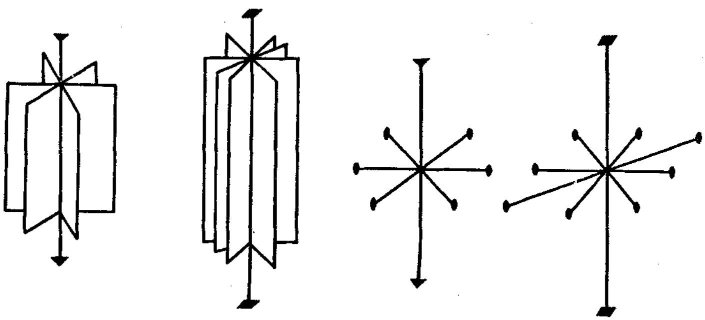


Рис. 34

оси n-го порядка и n отражений σ_v в вертикальных плоскостях. На рис. 34 изображены в качестве примера системы осей и плоскостей симметрии групп C_{3v} и C_{4v}.

Для определения классов замечаем, что благодаря наличию проходящих через ось симметрии плоскостей симметрии эта ось двусторонняя. Фактическое распределение элементов по классам различно при четных и нечетных n.

Если n нечетно ($n = 2p + 1$), то последовательные повороты C_{2p+1} совмещают каждую из плоскостей последовательно со всеми остальными $2p$ плоскостями, так что все плоскости симметрии

[1]) В конечной группе не может быть двух плоскостей симметрии, пересекающихся под углом, не равным рациональной части от 2π. Из факта наличия двух таких плоскостей следовало бы наличие бесконечного числа других плоскостей симметрии, пересекающихся вдоль одной и той же прямой и получающихся путем отражения неограниченное число раз одной плоскости в другой. Другими словами, наличие двух таких плоскостей приводит сразу к полной аксиальной симметрии.

эквивалентны и отражения в них входят в один класс. Среди поворотов вокруг оси имеется $2p$ операций, отличных от тождественной, которые попарно сопряжены друг с другом, образуя p классов по два элемента (C_{2p+1}^k и C_{2p+1}^{-k}, $k = 1, 2, \ldots, p$); кроме того, E составляет еще один отдельный класс. Таким образом, имеется всего $p + 2$ классов.

Если же n четно ($n = 2p$), то последовательными поворотами C_{2p} можно совместить лишь чередующиеся через одну плоскости; две соседние плоскости не могут быть совмещены друг с другом. Таким образом, имеются два набора по p эквивалентных плоскостей и соответственно два класса по p элементов (отражений) в каждом. Что касается поворотов вокруг оси, то $C_{2p}^{2p} = E$ и $C_{2p}^p = C_2$ составляют каждый сам по себе класс, а остальные $2p - 2$ поворотов попарно сопряжены и дают еще $p - 1$ классов по два элемента. Всего группа $\boldsymbol{C}_{2p,v}$ имеет, следовательно, $p + 3$ классов.

V. Группы $\boldsymbol{D}_n$

Если к оси симметрии n-го порядка присоединить перпендикулярную ей ось второго порядка, то это приведет к появлению еще ($n - 1$) таких же осей, так что будет всего n горизонтальных осей второго порядка, пересекающихся под углами π/n. Получающаяся группа $\boldsymbol{D}_n$ содержит $2n$ элементов: n поворотов вокруг оси n-го порядка и n поворотов на угол π вокруг горизонтальных осей (условимся обозначать последние посредством U_2, оставив обозначение C_2 для поворота на угол π вокруг вертикальной оси). На рис. 34 изображены в качестве примера системы осей групп $\boldsymbol{D}_3$ и $\boldsymbol{D}_4$.

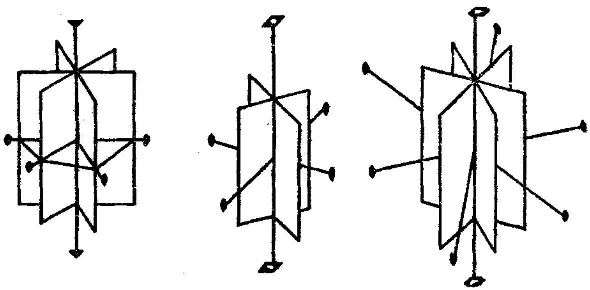
Совершенно аналогично предыдущему случаю, убеждаемся, что ось n-го порядка является двусторонней, а горизонтальные оси второго порядка все эквивалентны, если n нечетно, или образуют два неэквивалентных набора, если n четно. Следовательно, группа $\boldsymbol{D}_{2p}$ имеет следующие $p + 3$ классов: E, 2 класса по p поворотов U_2 в каждом, поворот C_2 и ($p - 1$) классов по два поворота вокруг вертикальной оси. Группа же $\boldsymbol{D}_{2p+1}$ имеет $p + 2$ классов: E, $2p + 1$ поворотов U_2 и p классов по два поворота вокруг вертикальной оси.

Важным частным случаем является группа $\boldsymbol{D}_2$. Ее система осей складывается из трех взаимно перпендикулярных осей второго порядка. Эту группу обозначают также посредством $\boldsymbol{V}$.

VI. Группы $\boldsymbol{D}_{nh}$

Если добавить к системе осей группы $\boldsymbol{D}_n$ горизонтальную плоскость симметрии, проходящую через n осей второго порядка, то при этом автоматически появится n вертикальных плоскостей, каждая из которых проходит через вертикальную ось и одну из горизонтальных осей. Получающаяся при этом группа D_{nh} содержит $4n$ элементов; кроме $2n$ элементов группы D_n в нее входят еще n отражений σ_v и n зеркально-поворотных преобразований $C_n^k\sigma_h$. На рис. 35 изображена система осей и плоскостей группы D_{3h}.

Отражение σ_h коммутативно со всеми остальными элементами группы; поэтому можно написать D_{nh} в виде прямого произведения $D_{nh} = D_n \times C_s$, где C_s есть группа из двух элементов E и σ_h.



D_{3h} D_{2d} D_{3d}

Рис. 35

При четном n в числе элементов группы имеется инверсия, и можно написать также $D_{2p,\,h} = D_{2p} \times C_i$.

Отсюда следует, что число классов в группе D_{nh} равно удвоенному числу классов в группе D_n. Половина из них совпадает с классами группы D_n (повороты вокруг осей), а остальные получаются из них умножением на σ_h. Отражения σ_v в вертикальных плоскостях относятся все к одному классу (если n нечетно) или образуют два класса (при четном n). Зеркально-поворотные преобразования $\sigma_h C_n^k$ и $\sigma_h C_n^{-k}$ попарно сопряжены друг с другом.

VII. Группы D_{nd}

Присоединить плоскости симметрии к системе осей группы D_n можно еще одним способом. Именно, можно провести их вертикально через ось n-го порядка посредине между каждыми двумя соседними горизонтальными осями второго порядка. Опять присоединение одной такой плоскости влечет за собой появление еще $(n-1)$ плоскостей. Получающаяся система осей и плоскостей симметрии определяет группу D_{nd} (на рис. 35 изображены оси и плоскости групп D_{2d} и D_{3d}).

Группа D_{nd} содержит $4n$ элементов. К $2n$ элементам группы D_n присоединяется n отражений в вертикальных плоскостях (обозначаемых посредством σ_d — «диагональные» плоскости) и n преобразований вида $G = U_2\sigma_d$. Для того чтобы выяснить характер последних, замечаем, что поворот U_2 можно, согласно (91,6), написать в виде $U_2 = \sigma_h\sigma_v$, где σ_v — отражение в вертикальной плоскости, проходящей через данную ось второго порядка; тогда $G = \sigma_h\sigma_v\sigma_h$ (преобразований σ_v, σ_h самих по себе в числе элементов группы, разумеется, нет). Поскольку плоскости отражений σ_v и σ_d пересекаются друг с другом вдоль оси n-го порядка, образуя угол $(\pi/2n)$ $(2k+1)$, где $k = 1, \ldots, (n-1)$ (поскольку здесь угол между соседними плоскостями равен $\pi/2n$), то, согласно (91,6), имеем $\sigma_v\sigma_d = C_{2n}^{2k+1}$. Таким образом, находим, что $G = \sigma_h C_{2n}^{2k+1} = S_{2n}^{2k+1}$, т. е. эти элементы представляют собой зеркально-поворотные преобразования вокруг вертикальной оси, оказывающейся, следовательно, не простой осью симметрии n-го порядка, а зеркально-поворотной осью $2n$-го порядка.

Диагональные плоскости отражают две соседние горизонтальные оси второго порядка друг в друга; поэтому в рассматриваемых группах все оси второго порядка эквивалентны (как при четных, так и при нечетных n). Аналогично, эквивалентны все диагональные плоскости. Зеркально-поворотные преобразования S_{2n}^{2k+1} и S_{2n}^{-2k-1} попарно сопряжены друг с другом [1]).

Применяя эти соображения к группе $\boldsymbol{D}_{2p,d}$, находим, что она содержит следующие $2p+3$ классов: E, поворот C_2 вокруг оси n-го порядка, $(p-1)$ классов по два сопряженных поворота вокруг той же оси, класс $2p$ поворотов U_2, класс $2p$ отражений σ_d и p классов по два зеркально-поворотных преобразования.

При нечетном n $(n = 2p+1)$ в числе элементов группы имеется инверсия (это видно из того, что одна из горизонтальных осей в этом случае перпендикулярна к вертикальной плоскости). Поэтому можно написать $\boldsymbol{D}_{2p+1,\,d} = \boldsymbol{D}_{2p+1} \times \boldsymbol{C}_i$, так что группа $\boldsymbol{D}_{2p+1,\,d}$ содержит $2p+4$ классов, получающихся непосредственно из $p+2$ классов группы $\boldsymbol{D}_{2p+1}$.

VIII. Группа $\boldsymbol{T}$ (группа тетраэдра)

Система осей этой группы есть система осей симметрии тетраэдра. Она может быть получена добавлением к системе осей группы $\boldsymbol{V}$ четырех наклонных осей третьего порядка, повороты вокруг которых переводят три оси второго порядка друг в друга. Эту систему осей удобно представить, изображая три оси второго порядка как проходящие через центры противоположных граней куба, а оси третьего порядка — как пространственные диагонали этого куба.

---

[1]) Действительно, имеем

$$\sigma_d S_{2n}^{2k+1}\sigma_d = \sigma_d\sigma_h C_{2n}^{2k+1}\sigma_d = \sigma_h\sigma_d C_{2n}^{2k+1}\sigma_d = \sigma_h C_{2n}^{-2k-1} = S_{2n}^{-2k-1}.$$

На рис. 36 изображено расположение этих осей в кубе и в тетраэдре (по одной оси каждого типа).

Три оси второго порядка эквивалентны между собой. Оси третьего порядка тоже эквивалентны, так как переводятся друг в друга поворотами C_2, но они не являются двусторонними осями. Отсюда следует, что 12 элементов в группе T распределяются по четырем классам: E, три поворота C_2, четыре поворота C_3 и четыре поворота C_3^2.

IX. Группа T_d

Эта группа содержит все преобразования симметрии тетраэдра. Систему ее осей и плоскостей можно получить, добавляя к осям группы T плоскости симметрии, каждая из которых проходит через одну ось второго и две оси третьего порядков. При этом оси второго порядка становятся зеркально-поворотными осями четвертого порядка (подобно тому как это имеет место в группе D_{2d}). Эту систему удобно представить, рисуя три зеркально-поворотные оси проходящими через центры противоположных

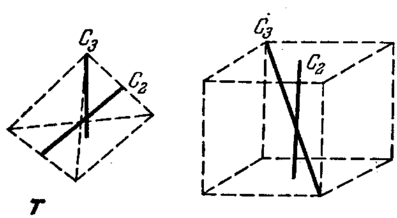


Рис. 36

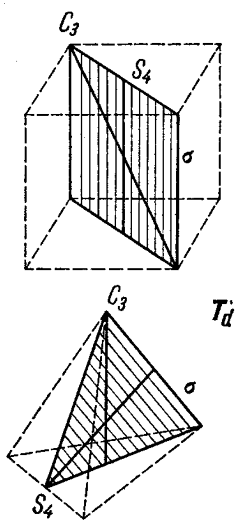


Рис. 37

граней куба, четыре оси третьего порядка, как его пространственные диагонали, шесть плоскостей симметрии проходящими через каждую пару противоположных ребер (на рис. 37 изображено по одному из каждого рода осей и плоскостей).

Поскольку плоскости симметрии вертикальны по отношению к осям третьего порядка, то последние являются двусторонними осями. Все оси и плоскости каждого рода эквивалентны. Поэтому 24 элемента группы распределяются по следующим 5 классам: E, восемь поворотов C_3 и C_3^2, шесть отражений в плоскостях, шесть зеркально-поворотных преобразований S_4 и S_4^3, три поворота $C_2 = S_4^2$.

X. Группа T_h

Эта группа получается из T добавлением центра симметрии: $T_h = T \times C_i$. В результате появляются три взаимно перпендикулярные плоскости симметрии, проходящие через каждые две оси второго порядка, а оси третьего порядка становятся зеркально-поворотными осями шестого порядка (на рис. 38 изображено по одной из этих осей и плоскостей).

Группа содержит 24 элемента, распределенных по 8 классам, непосредственно получающимся из классов группы T.

XI. Группа O (группа октаэдра)

Системой осей этой группы является система осей симметрии куба: три оси четвертого порядка проходят через центры противоположных граней, четыре оси третьего порядка — через противоположные вершины и шесть осей второго порядка — через середины противоположных ребер (рис. 39).

Легко видеть, что все оси одинакового порядка эквивалентны и каждая из них — двусторонняя. Поэтому 24 элемента распределяются по следующим 5 классам: E, восемь поворотов C_3 и C_3^2, шесть поворотов C_4 и C_4^3, три поворота C_4^2 и шесть поворотов C_2.

XII. Группа O_h

Это есть группа всех преобразований симметрии куба [1]). Она получается добавлением к группе O центра симметрии: $O_h = O \times C_i$. Оси третьего порядка группы O превращаются при

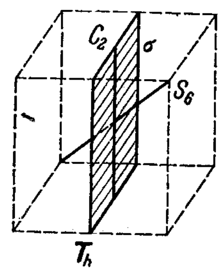


Рис. 38

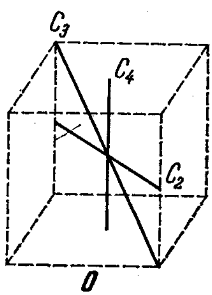


Рис. 39

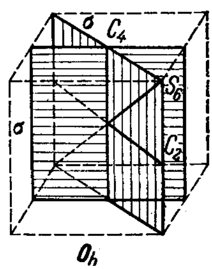


Рис. 40

этом в зеркально-поворотные оси шестого порядка (пространственные диагонали куба); кроме того, появляются еще шесть плоскостей симметрии, проходящих через каждую пару противоположных ребер, и три плоскости, параллельные граням куба (рис. 40). Группа содержит 48 элементов, распределенных по

[1]) Группы T, T_d, T_h, O, O_h называют *кубическими*.

10 классам, которые могут быть непосредственно получены из классов группы O. Именно, 5 совпадают с классами группы O, а остальными являются: I; восемь зеркально-поворотных преобразований S_6 и S_6^5; шесть зеркально-поворотных преобразований $C_4\sigma_h$, $C_4^3\sigma_h$ вокруг осей четвертого порядка; три отражения σ_h в плоскостях, горизонтальных по отношению к осям четвертого порядка; шесть отражений σ_v в плоскостях, вертикальных по отношению к этим осям.

XIII, XIV. Группы Y, Y_h (группы икосаэдра)

Эти группы осуществляются в природе в качестве групп симметрии молекул лишь в исключительных случаях. Поэтому мы ограничимся здесь указанием, что Y есть группа 60 поворотов вокруг осей симметрии икосаэдра (правильного 20-гранника с треугольными гранями) или пентагонального додекаэдра (правильного 12-гранника с пятиугольными гранями), причем имеется 6 осей пятого порядка, 10 — третьего и 15 — второго. Группа Y_h получается добавлением центра симметрии: $Y_h = Y \times C_i$, и представляет собой полную группу преобразований симметрии указанных многогранников.

Этим исчерпываются все возможные типы точечных групп, содержащих конечное число элементов. В дополнение к ним надо рассмотреть так называемые непрерывные точечные группы, содержащие бесконечное число элементов. Это будет сделано в § 98.

§ 94. Представления групп

Рассмотрим какую-либо группу симметрии, и пусть ψ_1 есть некоторая однозначная функция координат (в конфигурационном пространстве данной физической системы). При преобразовании системы координат, соответствующем элементу G группы, эта функция перейдет в некоторую другую функцию. Производя поочередно все g преобразований группы (g — порядок группы), мы получим из ψ_1 в общем случае g различных функций. При определенных выборах ψ_1 некоторые из этих функций могут, однако, оказаться линейно-зависимыми. В результате мы получим некоторое число f ($f \leqslant g$) линейно-независимых функций $\psi_1, \psi_2, \ldots, \psi_f$, которые при преобразованиях симметрии, входящих в рассматриваемую группу, преобразуются линейно друг через друга. Другими словами, в результате преобразования G каждая из функций ψ_i ($i = 1, 2, \ldots, f$) переходит в линейную комбинацию вида

$$\sum_{k=1}^{f} G_{ki}\psi_k,$$