群论与化学

〔英〕DAVID M.毕晓普著　新民 胡文海等译 胡玉才校

高等教育出版社

群论与化学

〔英〕DAVID M. 毕晓普著
新　民　胡文海等译
胡玉才 校

高等教育出版社

内 容 简 介

本书是群论原理如何应用于化学的教科书，全书共12章，即：对称性，对称操作，点群，矩阵，矩阵表示，等价和可约表示，不可约表示与特征标表，群的表示与量子力学，分子振动，分子轨道理论，杂化轨道，过渡金属化学。论述清楚易懂。本书可作为综合大学，高等师范院校化学系教师、研究生和高年级学生进行选修课学习时的教学参考书，亦可供工科及其它高等学校有关专业的师生和科学研究单位有关研究人员学习参考。

本书责任编辑蒋栋成。

DAVID M. BISHOP

Group Theory and Chemistry

CLARENDON PRESS. OXFORD 1973

群 论 与 化 学

〔英〕DAVID M. 毕晓普著

新民 胡文海等译 胡玉才校

*

高等教育出版社出版

新华书店北京发行所发行

人民教育出版社印刷厂印装

开本 850×1168 1/32 印张 11.625 字数 278,000

1983年1月第1版 1984年7月第1次印刷

印数 00,001—10,900

书号 13010·0853 定价 1.80元

译者的话

本书是吉林大学量子化学教师进修班期间（1978—1979年）由唐敖庆教授和孙家钟教授推荐翻译的几本量子化学英文书籍之一。这是一本群论原理应用于化学的教科书。对于群论的数学基础和表示理论的阐述，概念清楚，由浅入深，循序渐进，易读好懂。数学方面较复杂的推导和证明安排为各章的附录，便于有兴趣者研读。较之国内已有的一般的群论应用于化学的基础教科书，本书的系统性较强，数学论证更严格，而应用方面则比较简明。对于初学者，这是一本较好的入门书。参加本书翻译工作的有新民（内蒙古大学），胡文海（暨南大学），郭金波、宋玉林（辽宁大学），周伟良（华东师范大学），吴念慈（杭州大学），程经科（天津大学）和余庆森（浙江大学）八人。全书由胡玉才教授校订。译稿曾在华东师范大学，辽宁大学和内蒙古大学等校的化学系有关专业作为选修课教材试用多次，使用效果良好，因经过试用，故对改进翻译质量起了积极作用。孙家钟教授对于本书的翻译和出版，始终极为关心，我们深为感激。限于水平，译文中错误和不妥之处在所难免，敬请读者批评指正。

译　者

1983年元月

前　言

本书是为化学学生通晓群论如何应用于化学问题而写的。对于本书的内容，化学工作者通常遇到的主要障碍是所涉及的数学问题。为此，我试图在每章附录中将有关数学问题作较详细的阐明。这样，本书既可以作为论及一般性概念(不读附录部分)的导论来阅读，也可以做为本学科(包括附录)相当全面的叙述加以研读。建议读者在学习本书时，先不用看附录，在已经了解书的概貌后，第二次读本书时才连同附录一起读。

本书内容适用于大学高年级学生的课程或一年级研究生的课程。不带附录用 15 讲可以讲完，带附录用 21 讲可以讲完。

George Chrystal 在其所著《代数》一书的序言中的一段话也许是对这类书籍读者的最好忠告：

“对于每一本值得研读的数学书，必须‘反复’研读(如可用此语言的话)。我应该将 Lagrange 的忠告稍加修改，而说：‘前进，但要时常返回去以增加你的信心’。当你面临困难的或枯燥无味的段落时，越过它，在已经了解它的重要性或已经发现它在下文中的需要之后，再返回去读它”。

最后，对那些害怕数学的人鼓励几句。与推导群论理论相反，实际中应用群论理论公式所涉及的数学是很平常的，几乎与加法和乘法运算没有差别。甚至无需了解公式从何而来，按例行方法填入必要的公式即可作这些应用，事实上这是可能的。虽然，我并不提倡这样做。

D.M.Bishop 于伦敦

1972 年 12 月

致　谢

我在伦敦皇家学院休假期间完成了本书的大部分，承该院 Victor Gold 教授盛情款待，我向他深表感谢。P. W. Atkins 博士和 B. A. Morrow 博士，他们审阅了最后的全部打字稿，并向 A. D. Westland 教授致谢，他审阅了第十二章。

对于允许复制下列插图者，表示感谢。

图 1-2.1　（英国博物馆自然历史管理人员）。

图 1-2.3　（国家纪念馆资料 Crown 公司版权）。

图 1-2.5　（Victoria 和 Albert 博物馆，Crown 公司版权）。

图 12-7.2 和图 12-7.3　（B. N. Figgis《配位场导论》Interscience 出版社）。

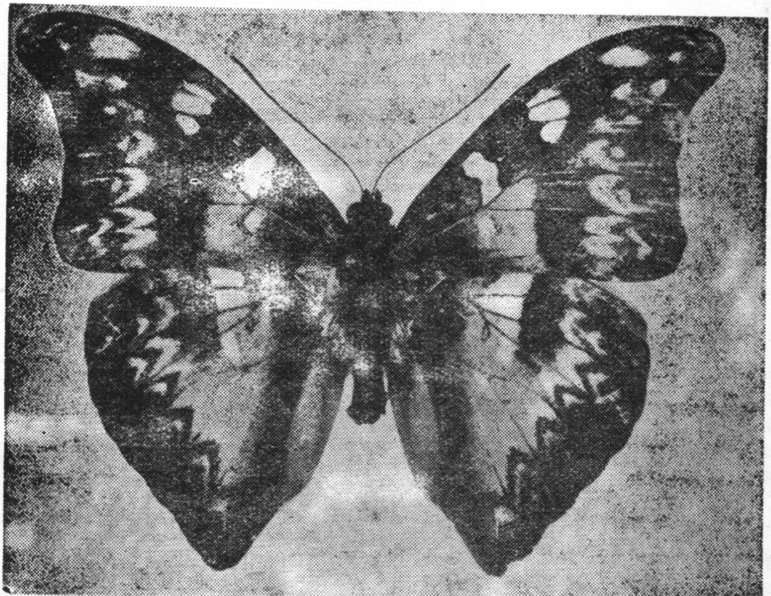
我同样地感谢 D. S. Schonland 博士允许在本书附录 I 中复制他所著《分子对称性》书中的特征标表。（Van Nostrand 有限公司）。

最后，对于 M. R. Robertson 夫人正确无误的打字，向她致谢。

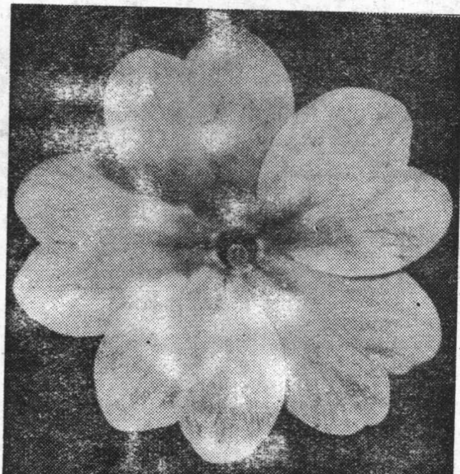
符号一览表

R	对称元素
$\boldsymbol{R}$	对称操作
$D(\boldsymbol{R})$	代表 $\boldsymbol{R}$ 的矩阵
$D_{ij}(\boldsymbol{R})$	$D(\boldsymbol{R})$的第 i 行第 j 列的元素
$\boldsymbol{O}_R$	对应于 $\boldsymbol{R}$ 的变换算符
A	矩阵，矩阵元素列在两对竖直线之间。
A_{ij}	A的第 i 行第 j 列的元素
$\mathscr{A}_{ij}$	$\det(A)$的 A_{ij} 的代数余因子
$\det(A)$	A的行列式
$\mathrm{Trace}(A)$	A的迹
A^*	A的共轭复数矩阵
$\widetilde{A}$	A的转置矩阵
$A^\dagger$	A的伴随矩阵
A^{-1}	A的逆矩阵
$\boldsymbol{X}$	矩阵
x_i	X的第 i 列
x_{ij}	X的第 i 行第 j 列的元素
E	单位矩阵
O	零矩阵
$\mathscr{G}$	点群
g	群的阶(群的元素数目)
g_i	群的第 i 类的元素数目
δ_{ij}	Kronecker δ(若$i\neq j$,则等于 0；若$i=j$,则等于1)

x_1, x_2, x_3	一个点的笛卡儿坐标
Γ	点群的表示
Γ^μ	点群的第μ个表示
$D^\mu(\boldsymbol{R})$	代表 Γ^μ 中 $\boldsymbol{R}$ 的矩阵
$D^\mu_{ij}(\boldsymbol{R})$	$D^\mu(\boldsymbol{R})$的第 i 行第 j 列的矩阵元素
n_μ	Γ^μ 的维数或 $D^\mu(\boldsymbol{R})$的阶
$\chi(\boldsymbol{R})$	Γ 中 $\boldsymbol{R}$ 的特征标
$\chi^\mu(\boldsymbol{R})$	Γ^μ 中 $\boldsymbol{R}$ 的特征标
$\boldsymbol{P}^\mu(\boldsymbol{R})$	投影算符 $\sum_{\boldsymbol{R}}\chi^\mu(\boldsymbol{R})^*\boldsymbol{O}_{\boldsymbol{R}}$
$\boldsymbol{P}^\mu_{ij}(\boldsymbol{R})$	投影算符 $\sum_{\boldsymbol{R}}D^\mu_{ij}(\boldsymbol{R})^*\boldsymbol{O}_{\boldsymbol{R}}$
a_μ	Γ^μ 在 Γ 中出现的次数
k	群的类数
$D^{\mathrm{reg}}(\boldsymbol{R})$	代表正规表示 Γ^{reg} 中 $\boldsymbol{R}$ 的矩阵
$\boldsymbol{C}_i$	点群的第 i 类中的任意操作
$\boldsymbol{R}^m_j$	点群中第m类的第 j 个操作
$\oplus$	联结一可约表示中诸不可约表示的符号
$\otimes$	联结直积表示中两个表示的符号
E_γ	第γ能级
ψ^γ	与 E_γ 联系的波函数
$\boldsymbol{X}$	若干个质点的一组坐标
$\boldsymbol{X}_{\mathrm{nuc}}$	若干个原子核的一组坐标
$\boldsymbol{X}_{\mathrm{el}}$	若干个电子的一组坐标

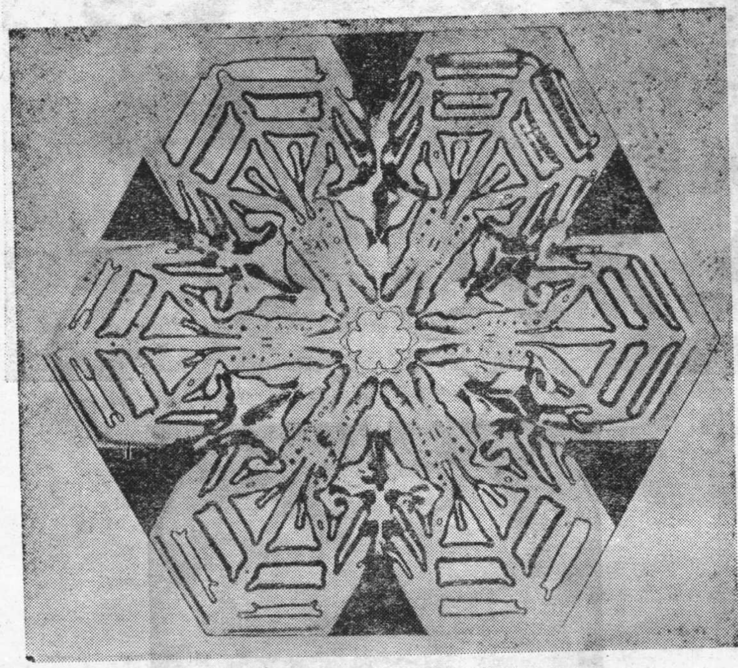


(a)



(b)

图 1-2.1 (a) 粉蝶 (b) 樱草花



(c)

图 1-2.1 (c) 冰晶体

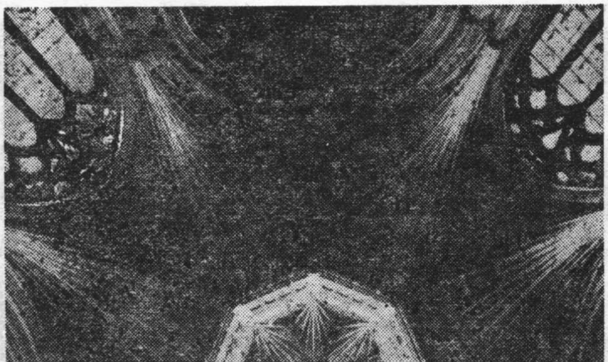


图 1-2.3　Ely 大教堂八角形天花板

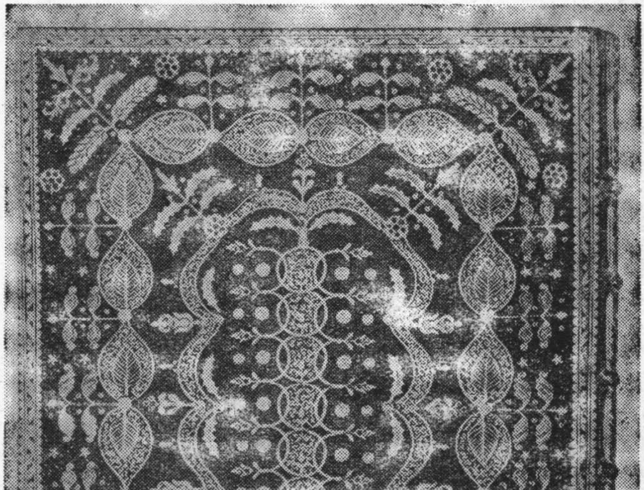


图 1-2.5　苏格兰式书籍装订一例。(约 1750 年)

目　录