

高等学校教材

群论基础及其化学应用

肖鹤鸣 编著



兵器工业出版社

群论基础及其化学应用

肖鹤鸣 编著

兵器工业出版社

群论基础及其化学应用

肖鹤鸣 编著

兵部：军工出版 出版

(北京市海淀区车道沟10号)

新华书店发行

五三一印刷厂印装

开本：787×1092 1/16 印张：17 字数：440千字

1987年12月第1版 1987年12月第1次印刷 印数：1—5000

统一书号：13471.007 定价：2.90元

ISBN 7-80038-006-8/O·1

内 容 简 介

全书分两大部分，共十八章。第一部分是群论基础，包括群的基本概念、点群、群的表示理论以及群论和量子力学的联系。第二部分是分子对称性和群论对化学的应用，涉及现代量子化学的各主要方面，含有许多为化学工作者所感兴趣的课题和资料。

本书不追求数学的深度和难度，而力求数学和化学实际的紧密结合；注重直观教学，以较多的例题、图表帮助读者掌握基本原理及其应用方法；每章附有典型习题供读者自习。

本书适用于大专院校一般化学专业的研究生和高年级大学生独立开课作教材，亦可作为学习《结构化学》、《高等无机化学》、《量子有机化学》、《分子光谱学》和《量子化学》等课程的参考书，对各专业化学教师和化学科技工作者也有参考价值。

本书由江元生主审，经原兵器工业部第二教材编审委员会炸药编审小组于1986年1月召开的全体会议审定，同意作为教材出版。原兵器工业部教材编审室责任编辑：孙业斌。

序 言

根据教育部“要多开选修课”、教材要“百花齐放满园春”的精神，一九八〇年以来笔者为华东工学院三系的研究生和高年级大学生讲授群论基础课，编写了《基础群论和化学》、《群论的化学应用》两本讲义，并于八三年合并铅印付用，取名为《群论基础及其化学应用》。

该铅印本教材由华东工学院教材科向兵器工业部教材编审室申报出版，请吉林大学江元生教授主审。在江教授的具体指导下，作者进行了认真的修改和补充。例如增写了“原子簇化合物的结构规则”（第十三章）、“群论和超共轭效应”（第十四章）和“分子的立体构型”（第十七章）等三章，并充实了其它章节，从而加强了应用部分，使之更适应于化学工作者的需要。

由于主要面向非“量化”专业的研究生和大学生，因此书中只详细讨论了点群（Point-Group），并未涉及空间群、旋转群和李群等；只着重介绍化学应用所需的基本概念、重要结论和具体方法，而不追求群理论的完整系统以及推导过程的详尽严格。

具备《线性代数》初级水平和《结构化学》基本知识的读者，不难读懂本书绝大部分内容。实际上，把抽象的群论和物质的具体对称性结合，运用群论方法解决一般问题，只需初等数学即可。然而，一旦掌握了这些概念和方法，其收益却很大。群论的符号和术语，在理化科技文献中到处出现，而且有增无己。它的应用无疑已遍及无机、有机、分析和物化等各个化学领域，尤其是扎根于结构化学和量子化学中。基于这种情况，目前在高年级大学生和研究生中，把群论内容独立出来作为基础课的呼声越来越高。但愿拙作能起抛砖引玉的作用。

在本书正式出版之际，作者回想起在（1978—1980年）全国量子化学进修班学习的情景，吉林大学校长唐敖庆教授、孙家钟教授和江元生教授等老师的精彩讲学及其高深论著，使作者获益非浅。想起了南京大学傅献彩教授、曾成教授、袁传荣副教授；本院肖学忠教授、教材科谢继光老师；还有华中师范大学刘范教授以及华东师范大学周伟良副教授等，他们都曾为本书的早日问世，给予过指导、推荐、关心、支持和帮助。在这里一并表示敬意和衷心感谢！

本书由兵器工业部第二教材编审委员会炸药编审小组审定，参加审定的小组人员有陆庆武、孙荣康、张熙和、胡瑞江、叶毓鹏及欧育湘。北京工业学院六系王建祺同志应邀参加了审定会。作者也在此表示谢意！

本书的编写和修改多用业余时间进行。限于作者水平，不足和错误在所难免。恳请读者批评指正。

肖鹤鸣

1980年2月初稿；

1985年5月修订于南京华东工学院

• V •

引 论

自然界的各种物质，无论动物、植物、还是矿物，包括我们人体，或其外表，或其内含，均具有某种对称性。化学家所关注的分子也往往具有一定对称性。以一些分子为例，借助于图表来定义对称元素和相应的对称操作，讨论对称操作之间的关系——本书就从这些比较容易接受的具体问题起步论述。

群论 (Group Theory) 是一门抽象的数学。它是研究对称性的最好工具。一般化学工作者若追求其理论的完善和推导过程的严密，必将如坠烟海。倘若只图以群论为工具解决化学问题，那么只要弄清基本概念和结论、掌握方法就可以了。而这是比较容易做到的。本书第二章介绍群的基本概念，读者一般不会感到困难；不过应该熟悉它，因为后面经常要用到。

抽象的群论为什么能和具体的分子对称性联系起来呢？诀窍在于分子的对称操作组成了一类群——分子群或称点群。假如学完第三章之后，读者能凭想象（那是最好的）或借助于模型（也是允许的）能正确地判断任意分子属于哪一种点群，那么就算初步达到了学习本章的目的。至于熟悉各点群元素的分类，本书虽化费了较大篇幅，但只应看作是进一步提高的要求。

群论的最重要部分是表示（或译为表象）理论 (Representation Theory)。关于群的不等价不可约表示的概念，关于特征标表的来源和含意，关于群表示的重要定理，关于可约表示向不可约表示的分解等是第四章的精髓，也是本书的核心，务必透彻地理解和掌握。学习本章的主要困难可能是线性代数必要知识的欠缺或遗忘。为方便这部分读者，安排了附录一和二。附录三和本章最后一节是专为钻研理论问题有浓厚兴趣的读者提供的（以星号*标注，下同）。

认识物质结构的最重要理论武器是《量子力学》 (Quantum Mechanics)。量子力学对化学的应用便形成了《量子化学》。而群论架起了分子对称性和量子力学之间联系的桥梁。鉴于描述电子运动状态的波函数 (Wavefunction) 必须构成分子所属点群的不可约表示的基 (Base)，所以从分子的对称性出发，运用群论方法，有助于解决结构化学和量子化学中的许多问题。第五章部分地承担着这样搭桥任务，它把第一部分“群论基础”和第二部分“群论的化学应用”沟通起来。教学的重点自然应放在前五章。

后十三章从浅显的“对称性的直观应用” (第六章)，到精深的当代理论化学的重大发现：“分子轨道对称守恒原理” (第十八章)，涉及到现代量子化学的各主要方面。首先讨论原子轨道的对称类型 (第七章)，这是研究分子轨道的前提。继而讨论“杂化轨道的建立” (第八章)， AB_n 型分子的能级图绘制 (第九章)，以及共轭分子的HMO计算 (第十章)；展示群论对于价键理论和分子轨道理论的定性描述，或简化计算，都是极其有用的。第十一章介绍分子轨道图形理论中的一些知识和定理；利用分子对称性约化本征多项式的定理，本质上也可归属于群论的应用。第十二章讨论群的不可约表示相关性和双值表示，为在

配体场理论和下述章节中深入应用群论奠定基础。原子簇化合物 (Cluster Compound) 的研究成为近代无机化学的最热门课题; 第十三章介绍原子簇化合物的结构规则以及群论在阐明这些规则中的应用。利用群及其子群间的不可约表示相关性研究超共轭效应 (Hyperconjugation) 可导致有意义的结果, 这在第十四章给予专门研究。在分子光谱学 (Spectroscopy) 中, 群论和量子力学并称为两大支柱, 没有群论和没有量子力学一样, 就谈不上有任何光谱和波谱实验事实的理论剖析; 作为这方面的入门引导, 在“分子的总状态对称性” (第十五章) 和“分子振动” (第十六章) 两章中, 例举了群论在剖析电子光谱和红外光谱中的应用。利用Walsh型相关图和价电子数预测分子的立体构型是化学家很感兴趣的课题 (第十七章), 通常归属于定性分子轨道理论。最后以“分子轨道对称守恒原理的新发展” (第18-3节) 结束本书, 旨在进一步推崇我国科学家的重要工作。

后十三章尽管已涉及群论在化学各领域中的许多应用方面和应用实例, 但显然不可能包罗万象, 面面俱到。取材带有一些任意性。不同章节之间有相对独立性。读者可根据兴趣和专业需要选用。不能通晓全部章节的原因不一定是没有掌握群论方法, 很可能是因为缺乏结构化学或量子化学的专门知识——而本书又不可能在这方面过于膨胀。为此在附录五中列一书目, 供读者深入研讨时参考。

目 录

序言.....	(V)
引论.....	(VI)

第一部分 群论基础

第一章 对称元素和对称操作	(1)
1-1 何谓对称元素和对称操作.....	(1)
1-2 旋转轴和旋转.....	(2)
1-3 对称面和反映.....	(4)
1-4 对称中心和反演.....	(5)
1-5 象转轴和象转.....	(6)
1-6 对称操作的乘积.....	(8)
1-7 乙烷分子的对称元素和对称操作.....	(10)
1-8 氨分子的对称元素和对称操作.....	(11)
习题.....	(14)
第二章 群的基本概念	(16)
2-1 群的定义.....	(16)
2-2 群的例子. 群表.....	(17)
2-3 子群.....	(20)
2-4 共轭元素类.....	(21)
2-5 对称操作分类的简单规则.....	(22)
2-6 同构和同态.....	(24)
2-7 两个群的直积.....	(26)
习题.....	(27)
第三章 分子群	(29)
3-1 无轴群 C_1 , C_s 和 C_i	(29)
3-2 具有单轴 C_n 的群 C_n , C_{nv} , C_{nh} , S_n	(30)
3-3 具有一个 C_n 轴和 n 个 C_2 轴的群 D_n , D_{nh} , D_{nd}	(33)
3-4 (直)线型分子所属的特殊群 $D_{\infty h}$, $C_{\infty v}$	(36)
3-5 具有多重高次轴的特殊群 T_d , O_h , I_h	(36)
3-6 确定分子所属点群的系统方法.....	(40)
习题.....	(43)
第四章 点群的表示理论	(46)
4-1 对称操作的矩阵形式.....	(46)

4-2	C_{3v} 的一个三维表示	(51)
4-3	C_{3v} 的不等价不可约表示	(56)
4-4	特征标表	(61)
4-5	群表示的重要定理	(66)
4-6*	某些重点群的特征标表及其造法	(71)
	习题	(79)
第五章	群论和量子力学	(81)
5-1	薛定格方程、波恩—奥本海默 (Born-Oppenheimer) 近似和哈特利 (Hartree) 近似	(81)
5-2	波函数作为不可约表示的基	(83)
5-3	群中的直积表示	(85)
5-4	投影算子及其有关定理	(88)
5-5	群轨道的造法	(91)
	习题	(100)

第二部分 群论的化学应用

第六章	对称性的直观应用	(101)
6-1	分子光学活性的判别	(101)
6-2	分子偶极矩的判别	(103)
6-3	取代产物类型的判别	(104)
6-4	化学位移等价性的判别	(104)
	习题	(106)
第七章	中心原子s, p和d轨道的对称类型	(107)
7-1	s, p和d轨道的角波函数及其图形	(107)
7-2	s, p和d轨道的对称类型	(108)
7-3	两个例子	(109)
7-4*	f轨道在 T_d 群中分类	(112)
	习题	(115)
第八章	杂化轨道的建立	(116)
8-1	σ 成键的杂化方案	(116)
8-2	π 成键的杂化方案	(119)
8-3	杂化轨道的数学表达式	(120)
	习题	(124)
第九章	AB_n型分子的LCAO—MO法	(126)
9-1	LCAO—MO近似	(126)
9-2	平面正方形络合物 MX_n 的 LCAO—MO法	(127)
9-3	正八面体络合物 MX_6 的 LCAO—MO法	(134)

习题	(140)
第十章 有机共轭分子的HMO方法	(142)
10-1 π 电子近似和 HMO 方法	(142)
10-2 丁二烯的 π 电子能级和轨道	(143)
10-3 苯的 π 电子能级和轨道	(147)
10-4 含杂体系—1,4-二氢吡嗪的 HMO 处理	(150)
习题	(152)
第十一章* 群论和图论在HMO方法中的结合应用	(153)
11-1 关于分子图形的一些知识	(153)
11-2 计算本征多项式的递推方法	(155)
11-3 利用分子对称面约化本征多项式	(157)
习题	(161)
第十二章 群的相关表和双值表示	(162)
12-1 寻求不可约表示相关性的一般步骤	(162)
12-2 O_h 群的相关表 d 轨道的能级分裂	(163)
12-3 旋转群操作下球谐函数的变换性质	(166)
12-4 双值群	(167)
习题	(169)
第十三章 原子簇化合物的结构规则	(171)
13-1 原子簇化合物举例	(171)
13-2 硼烷的结构 (I) Wade的N+1 规则	(174)
13-3 硼烷的结构 (II) 唐敖庆的拓扑规则	(174)
13-4 拓扑结构规则的量子化学阐明	(176)
13-5 杂硼烷的结构规则	(178)
13-6 杂硼烷结构规则的群论分析	(179)
习题	(181)
第十四章 群论和超共轭效应	(182)
14-1 HCJ 的理论研究回顾	(182)
14-2 甲苯中 HCJ 的群论处理	(184)
14-3 用群论方法研究 HCJ 的一般步骤	(187)
14-4 丙烯和丙炔中的 HCJ	(188)
14-5 HCJ 的加和性	(189)
14-6 HCJ和分子的稳定性	(191)
习题	(192)
第十五章 分子的总状态对称性	(194)
15-1 分子的总状态描述 Slater 行列式	(194)
15-2 分子的总状态分类 谱项	(196)
15-3 电偶极矩跃迁选律	(200)

15-4 丁二烯和苯的电子光谱	(201)
习题	(204)
第十六章 分子振动	(208)
16-1 正则振动方式数	(208)
16-2 振动表示的特征标	(206)
16-3 正则振动方式的对称类型	(209)
16-4 基频振动跃迁选律	(211)
习题	(214)
第十七章 分子的立体构型	(215)
17-1 分子结构和分子轨道的层次	(215)
17-2 H_2^+ 和 H_2 的变分计算结果讨论	(215)
17-3 定性分子轨道理论的规则	(218)
17-4 Walsh型相关图的应用 (I) HAH类的分子构型	(218)
17-5 Walsh型相关图的应用 (II) HAB和 H_3AAH_3 类的分子构型	(221)
17-6 前线轨道方法	(224)
习题	(226)
第十八章 分子轨道对称守恒原理	(227)
18-1 某些有机反应经验规律	(227)
18-2 能量相关图的建立和运用	(229)
18-3* 分子轨道对称守恒原理的新发展	(232)
习题	(236)
附录	(238)
一、向量及其标 (量) 积	(238)
二、矩阵及其运算	(239)
三*、广义正交定理的证明	(243)
四、重要分子群的特征标表	(248)
五、书目	(260)

第一部分 群论基础

第一章 对称元素和对称操作

(Symmetry Elements and Operations)

对称是自然界各种物质的固有性质。“对称”这个词在日常生活中已普遍地运用着。但为了科学地、系统地研究分子的对称性，还必须严格地定义分子的各种对称元素和相应的对称操作，研究它们之间的一些关系。

1-1 何谓对称元素和对称操作

(What is Symmetry Element and Operation)

顾名思义，对称元素是指客观存在的几何实体，或是一个点，或是一条直线，或是一个平面，它们是讨论物体具有对称性的依据；而对称操作则是一个动作，一种变换。依据一定的对称元素，进行一定的（不改变物体中任何两点距离的）操作之后，如果物体的每一点都与经受操作之前的等价点——物理上不能区分的点——相重合，亦即物体复原了，那么所进行的这种操作就是对称操作。

比如讨论平面正三角形分子 AX_3 （如 BF_3 ， NO_3^- 等）。为讨论方便计，人为地将 X 编上号（见图1-1（a））。此分子绕通过 A 原子（核）且垂直于分子平面（纸面）的直线逆时针旋转 120° 至新的位置（见图1-1（b））。因为 X （核）在物理上彼此不能区分，所以完成了一个对称操作——旋转，而旋转操作的依据——旋转轴，就是相应的对称元素。反过来说也可以，即该分子有对称元素——旋转轴，则必然对应地有对称操作——旋转。由此可见，对称元素和对称操作是密切相关的：一个对称元素的存在取决于一个或几个对称操作的存在；而对称操作也只有与对称元素相联系才能得到定义。我们通常同时研究对称元素和由

• 旋转方向可规定为顺时针，也可规定为逆时针，在同一问题中必须统一。本书一律规定面向旋转轴，保持轴不动，按逆时针方向绕轴转动物体。

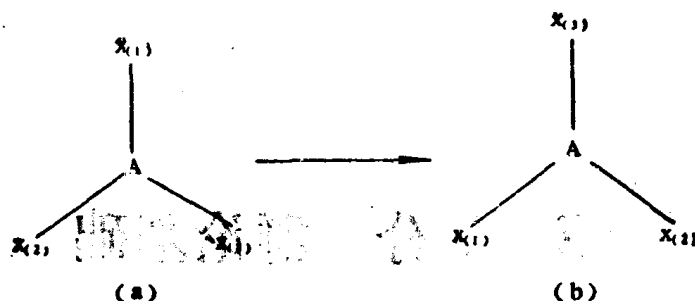


图1-1 把平面三角形分子旋转 ($2\pi/3$ rad)

它产生的对称操作。

从上例还可以看出,对称操作的效果是把分子引入等价构型 (Equivalent Configuration) ——和起始构型物理上不能区别的构型。显然,对称操作不会改变分子的任何性质。

根据对称性理论,研究有限分子*(核固定在平衡位置形成的骨架)的对称性,只需要四种对称操作。其它对称操作都可以归属于这四类。它们是:旋转、反映、反演和象转。下面逐一讨论。

1-2 旋转轴和旋转

(Rotation Axis and Rotation)

旋转轴又称对称轴 (Symmetry Axis), 或真轴 (Proper Axis)。旋转又称为真转动 (Proper Rotation)。

仍以 AX_3 型分子为例 (图 1-2 (a))。绕垂直于分子平面 (纸面) 且通过 A 核的轴旋转 $2\pi/3$ rad, 得到 (a) 的等价构型 (b)。继续旋转 $2\pi/3$, 得到 (c), 也是 (a) 的等价构型。只不过 (b) 和 (c) 中被标号的 X 原子的位置发生了变化。若 (c) 再旋转 $2\pi/3$, 则各原子恢复到起始位置, 仍得到 (a)。一般把旋转 2π 得到的构型称为起始构型的恒等构型 (Identical Configuration)。恒等构型可看作等价构型的特例。

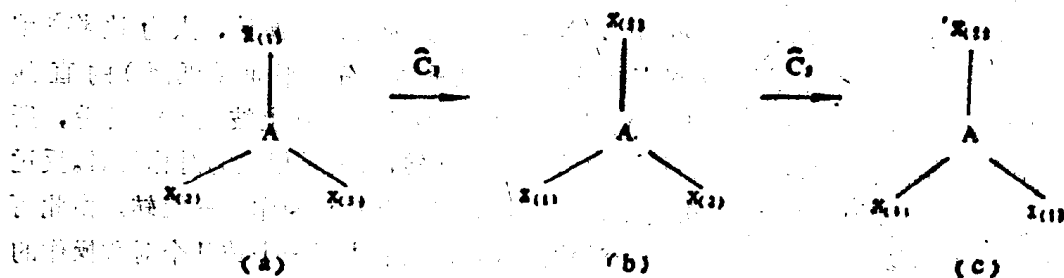


图 1-2 对平面正三角形分子施以 $\hat{C}_3$ 操作

旋转轴以符号 C_n 表示, n 为旋转轴次, 是绕该轴旋转 2π 出现等价构型的次数。 n 是整

*注上“有限”二字, 说明不是晶体。研究晶体的对称性, 还需要一类对称操作——平移。

数。 $2\pi/n$ 是得到等价构型的最小旋转角，称为基转角，上例的基转角是 $2\pi/3$ ，旋转 2π 得到三个等价构型，故旋转轴是三次轴，以 C_3 表示。 ΔX_3 正三角形分子还有三个二次轴 C_2 。每个A—X键就是一个 C_2 轴，基转角为 $2\pi/2$ 。在具有多个旋转轴的分子中，轴次最高的旋转轴叫做主轴 (Principal Axis)。 ΔX_3 型分子的主轴是 C_3 。

旋转 $2\pi/n$ 的操作以 $\hat{C}_n$ 表示 (或用黑体字 $\mathbf{C}_n$ 表示，以区别旋转轴 C_n)。每次旋转 $2\pi/n$ ，连续完成 m 次的旋转，用符号 $\hat{C}_n^m$ 表示；其效果等价于完成一次旋转，旋转角度为 $(m \times \frac{2\pi}{n})$ 。

n 次轴 C_n ，共生成 n 个操作： $\hat{C}_n, \hat{C}_n^2, \dots, \hat{C}_n^{n-1}, \dots, \hat{C}_n^n$ ，转动角度依次为 $2\pi/n, 2 \times 2\pi/n, \dots, (n-1) \times 2\pi/n \dots 2\pi$ 。 $\hat{C}_n^n$ 的效果为不动，得到恒等构型。不动操作亦即恒等操作，通常以 $\hat{E}$ 表示，故 $\hat{C}_n^n = \hat{E}$ 。

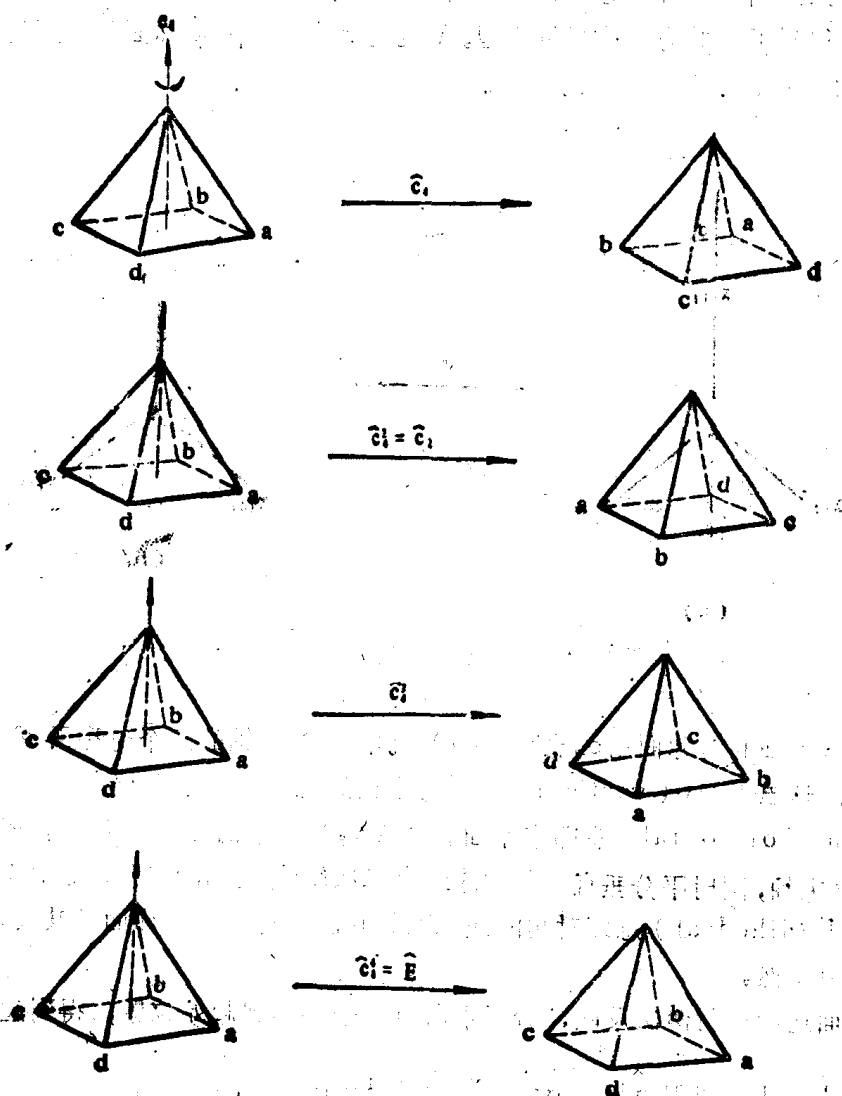


图1-3 C_4 轴生成的四个对称操作

图 1-3 给出以正方形为底的锥体。设正方形的四个顶点有相同的原子，人为地编号为 a, b, c 和 d。显而易见， C_4 轴生成的四个对称操作为： $\hat{C}_4$ ， $\hat{C}_4^2 = \hat{C}_2$ ， $\hat{C}_4^3$ 和 $\hat{C}_4^4 = \hat{E}$ 。

1-3 对称面和反映

(Symmetry Plane and Reflection)

若分子中所有原子（核）经过某平面（镜面）的反映得到起始构型的等价构型，则此平面就是该分子的对称面。以符号 σ 表示。反映操作以 $\hat{\sigma}$ 表示。

平面正三角形分子 AX_3 有四个对称面。分子平面是一个对称面，因为通过该面反映，处于反映面上的各原子的位置均无变化，得到了起始构型的恒等构型。通过 $A-X_{(1)}$ 且垂直于分子平面的面也是一个对称面（见图 1-4 (a)），因为在此平面中的一次反映结果，只交换了 $X_{(2)}$ 和 $X_{(3)}$ ，得到了起始构型的等价构型。 AX_3 的其余两个对称面是分别地通过 $A-X_{(2)}$ 和 $A-X_{(3)}$ ，且均垂直于分子平面的平面。

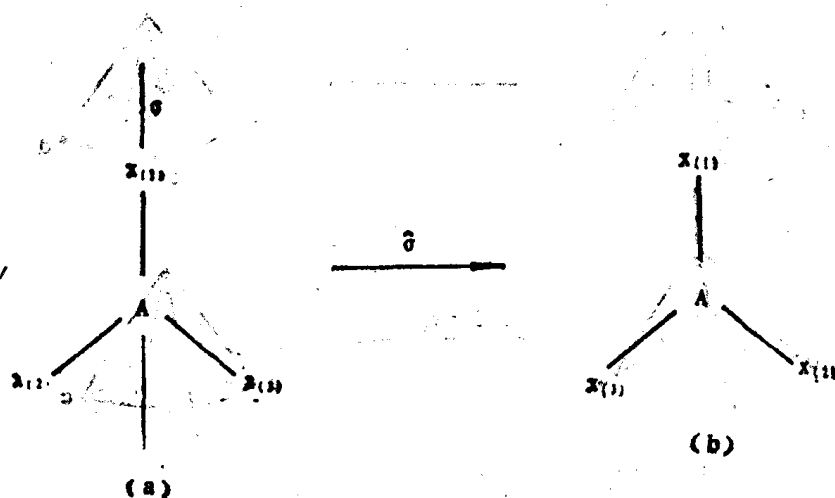


图 1-4 平面正三角形分子通过一次反映

分子中包含主轴的对称面用 σ_v 表示，如 AX_3 中包含 C_3 轴的三个对称面可分别表示为 σ'_v ， σ''_v 和 σ'''_v 。这里下标 v (vertical) 表示垂直面的意思。分子中垂直于主轴的对称面用 σ_h 表示，下标 h (horizontal) 意即水平面。如 AX_3 分子平面即 σ_h 对称面。还有一种特殊类型的 σ_d ，它包含主轴，同时平分垂直于主轴的两个二次轴 C_2 之间的夹角；这种对称面用 σ_d 表示 (d (diagonal 或 dihedral) 意即对角的或二面的)。上述这些对称面及其反映效应，从图 1-5 可以一目了然。

通过对称面连续进行两次反映，分子中所有原子均回到起始位置，得到起始构型的恒等构型。即 $\hat{\sigma}^2 = \hat{E}$ 。由此推得 $\hat{\sigma}^{2n} = \hat{\sigma}^2 = \hat{E}$ ， $\hat{\sigma}^{2n+1} = \hat{\sigma}$ 这里 n 是整数。

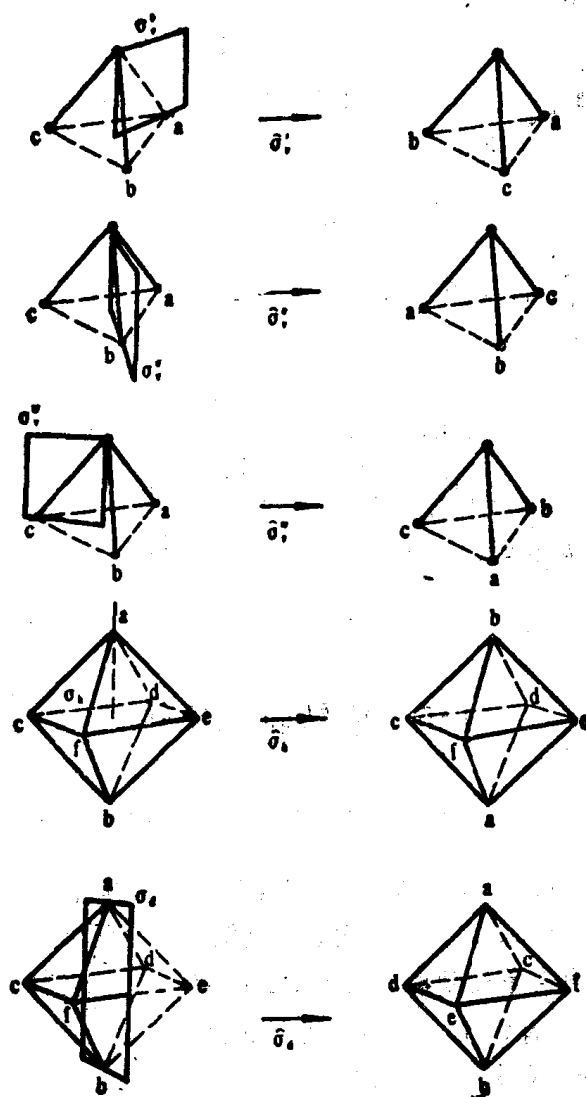


图 1-5 对称面和反映

1-4 对称中心和反演

(Center of Symmetry and Inversion)

若分子中的所有原子通过中心的反演得到等价构型，则称该分子有对称中心，以 i 表示。通常令直角坐标系的原点 O 处于分子的对称中心，通过原点的反演，使坐标为 (x, y, z) 的核变到 $(-x, -y, -z)$ ；另一种说法意义相同，即通过 O 点的反演，使任意核 A 变到 OA 线上的核 A' ，且 $OA' = OA$ 。反演操作用 $\hat{i}$ 表示。

BF_3 分子没有对称中心，因为以 B 核为原点的反演给出在物理上可区别的构型（见图 1-6）。

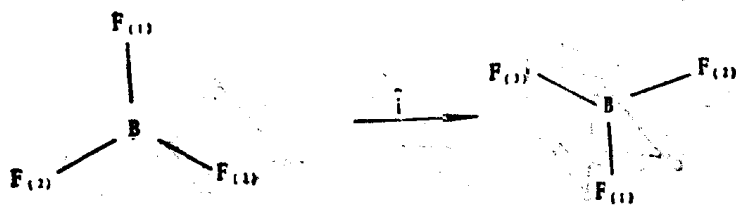


图 1-6 BF_3 的反演效应

对于 SF_6 分子，通过 S 核的反演，给出了等价构型，故 SF_6 有对称中心（见图 1-7）。

通过对称中心连续进行两次反演，其效应等于不动。即 $\hat{i}^2 = \hat{E}$ 。由此推得，当 n 为奇数时， $\hat{i}^n = \hat{i}$ ；当 n 为偶数时， $\hat{i}^n = \hat{E}$ 。

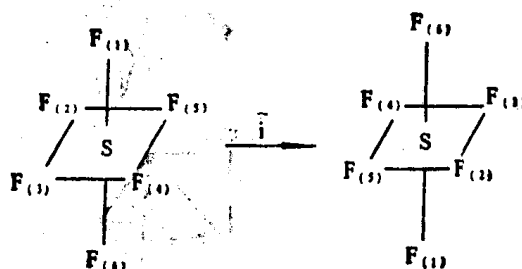


图 1-7 SF_6 的反演效应

1-5. 象转轴和象转

(Rotation—Reflection Axis and Rotation—Reflection)

象转轴又称为非真轴 (Improper Axis)，象转又称为非真转动 (Improper Rotation)。

分子绕某轴旋转 $2\pi/n$ 后，再通过垂直于此轴的平面反映，如果得到起始构型的等价构型，那么就说该分子具有象转轴，以 S_n 表示。象转是旋转和反映的复合对称操作，以 $\hat{S}_n$ 表示。很显然，若某分子有 C_n 轴，又有垂直于此轴的对称面，则此 C_n 轴即 S_n 轴。如 BF_3 中的 C_3 轴即 S_6 轴。有时分子有 S_n 轴，但此轴并非它的 C_n 轴，例如 CH_4 分子（见图 1-8）先转动 $2\pi/4$ 得不到等价构型，说明 CH_4 没有 C_4 轴；若继之再通过垂直于此轴（并包含 C 核）的平面反映，便得到与反映和旋转之前等价的构型，说明 CH_4 有 C_4 轴。甲烷的三个四次象转轴，每一个都分别垂直于（四面体分子被内接在其中的）立方体的一对平面。

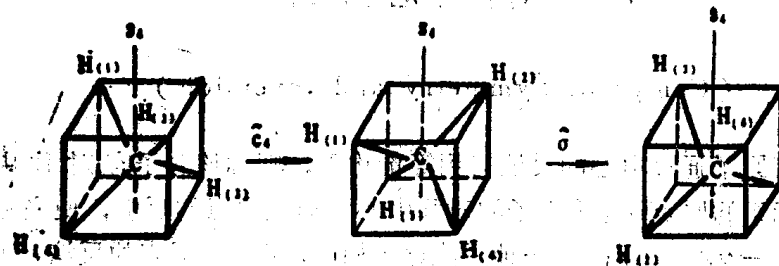


图 1-8 甲烷 S_4 轴和 $\hat{S}_4$ 操作

根据定义， $\hat{S}_1$ 是绕某轴旋转 2π 、接着在垂直于此轴的平面中的反映。因旋转 2π 物体复