

где χ_r — характер приводимого представления для операции r (т. е. представления размерности $3N \times 3N$, по k -рому преобразуются произвольно выбранные смещения атомов), χ_r^* — характер неприводимого представления Γ_r , индекс «*» указывает на комплексное сопряжение, g — порядок точечной группы. Характеры χ_r определяются по поведению декартовых координат атомов при операциях точечной группы. При идентичной операции E все координаты всех атомов остаются неизменными, поэтому $\chi_E = g$. Если при операции r атомы меняются местами, то их вклад в χ_r равен нулю. Напр., для H_2O $\chi_E = 9$, $\chi_{C_2} = -1$ [$H_{(1)}$ и $H_{(2)}$ меняются местами, $y(0)$ остаётся неизменной, а $x(0)$ и $z(0)$ меняют знак], $\chi_{\sigma_{xy}} = 1$, $\chi_{\sigma_{yz}} = 1$. Характеры χ_r^* приведены в табл.:

γ	E	C_2	σ_{xy}	σ_{yz}	T, R
A_1	1	1	1	1	T_y
A_2	1	1	-1	-1	R_y
B_1	1	-1	1	-1	T_x, R_x
B_2	1	-1	-1	1	T_z, R_z

В последнем столбце даны типы симметрии вращений и трансляций (относительно осей x, y, z) молекулы в целом. Тогда из (3) следует

$$n_{A_1} = 3, \quad n_{A_2} = 1, \quad n_{B_1} = 3, \quad n_{B_2} = 2. \quad (4)$$

За вычетом трёх вращений и трёх трансляций получим два колебания типа A_1 и одно колебание типа B_1 , k -рые обозначаются также символами $\nu_1, \nu_2(A_1)$ и $\nu_3(B_1)$.

Осн. колебат. состояние всегда относится к типу A_{1g} , первое возбуждённое состояние колебания типа Γ_r принадлежит к тому же типу симметрии Γ_r , типы симметрии более высоких возбуждённых состояний определяются из прямых произведений симметризованных степеней типов симметрии возбуждённых колебаний. Если в данном состоянии молекулы возбуждено n колебаний типа Γ_r , m колебаний типа Γ_s и т. д., то тип симметрии такого состояния определяется из прямого произведения симметризов. степеней $[\Gamma^n], [\Gamma^m]$ и т. д. Напр., тип симметрии состояния с возбуждением одного колебания $\nu_3(E)$ и двух квантов колебания $\nu_4(E)$ молекулы NH_3 будет $E \times [E^2] = E \times (A + E) = E + A_1 + A_2 + E = A_1 + A_2 + 2E$.

Модельные симметрии. Если молекула не содержит тождественных ядер, то её ПИ-группа сводится к группе инверсий (E, E^*): симметричные и антисимметричные состояния такой молекулы (напр., CH_3Cl) могут отличаться по энергии только за счёт слабых электронно-ядерных взаимодействий. Однако и для таких молекул при решении конкретных модельных задач часто оказываются полезными группы симметрии более высоких порядков. Напр., в теории вращат. спектров в качестве нулевого приближения используется модель жёсткого волчка, k -рой присуща своя симметрия. Гамильтониан молекулы типа жёсткого асимметричного волчка

$$\hat{H} = B_x J_x^2 + B_y J_y^2 + B_z J_z^2 \quad (5)$$

инвариантен относительно поворотов на 180° вокруг гл. осей инерции x, y, z (J_x, J_y, J_z — соответствующие моменты), т. е. относительно операций точечной группы D_2 4-го порядка. Учёт этой симметрии даёт полезный способ классификации вращат. уровней асимметричного волчка и позволяет разложить матрицу вращат. энергии на 4 блока. Гамильтониан молекулы типа

симметричного волчка, получаемый из (5) при $B_x = B_y$, инвариантен относительно операций группы $D_{\infty h}$ любых поворотов вокруг оси z и отражения на плоскости σ_{xy} . Эта группа позволяет классифицировать вращат. уровни энергии молекул типа симметричного волчка по квантовому числу K . Модельная симметрия часто используется и для нежёстких молекул, когда некие атомные группы в молекуле имеют достаточно высокую симметрию, хотя сама молекула высокой симметрии не имеет. Напр., если молекула содержит CH_3 -группу, то при изучении внутр. вращения такой группы используется точечная группа C_{3v} . В частности, туннелирование группы CH_3 в периодич. потенциальной яме с тремя минимумами приводит к известному дублетному $A - E$ -расщеплению уровней по типам симметрии точечной группы C_{3v} . Более сложное кватертное туннельное расщепление уровней молекулы с двумя CH_3 -группами [напр., $(CH_3)_2CO$] классифицируется по типам симметрии прямого произведения $C_{3v} \times C_{3v}$.

Лит.: Б а н к е р Ф., Симметрия молекул и молекулярная спектроскопия, пер. с англ., М., 1981; см. также лит. при ст. *Молекулярные спектры*. М. Р. Алев.

СИММЕТРИЯ СРТ — см. Теорема СРТ.

СИММЕТРИЯ $SU(2)$. В физике обычно реализуется как инвариантность относительно группы матричных преобразований над полями ψ_j ; $\psi_j \rightarrow U_{jj}\psi_j$, где U_{jj} — матричное представление группы $SU(2)$. Группа $SU(2)$ — совокупность унитарных унимодулярных матриц 2-го порядка (образующая группу по отношению к обычному матричному умножению). Унитарность обеспечивает неизменность нормы двумерного комплексного вектора (столбца), k -рый преобразуется такой матрицей. Условие унимодулярности, т. е. равенство определителя единице, исключает матрицы, отличающиеся от единичной лишь домножением на числовой фазовый множитель.

Любая унитарная унимодулярная матрица U представима в виде $U = \exp(iH)$, где H — эрмитова бесследовая матрица ($H = H^+$, $\text{Sp}H = 0$), k -рую можно выразить линейной комбинацией $n^2 - 1$ линейно независимых базисных матриц такого типа (для матриц n -го порядка). Каждая унитарная унимодулярная матрица 2-го порядка задаётся тремя веществ. параметрами, k -рые могут принимать непрерывные значения. Это значит, что $SU(2)$ — трёхпараметрич. группа Ли. $SU(2)$ — простая группа, т. е. она не содержит инвариантных подгрупп Ли.

Отметим роль условия унимодулярности. Отказавшись от него, мы получим группу $U(2)$, k -рая является прямым произведением двух групп — группы $SU(2)$ и абелевой группы Ли $U(1)$, соответствующей числовым фазовым множителям. Каждая из них является инвариантной подгруппой группы $U(2)$. Подчеркнём, что группа $SU(2)$ неабелева, т. е. два преобразования, являющихся её элементами, могут не коммутировать друг с другом.

Если матрицы, реализующие группу $SU(2)$, параметризовать в виде

$$\exp\left(i \frac{\theta}{2} \sigma n\right) = \cos \frac{\theta}{2} + i \sigma n \sin \frac{\theta}{2},$$

где $\sigma = (\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3)$ — Паули матрицы, n — вещественный единичный 3-компонентный вектор ($n^2 = 1$), то бесконечно малые преобразования порождаются генераторами группы $I_k = \sigma_k/2$. Их перестановочные соотношения $[I_j, I_k] = i\epsilon_{jkl}I_l$ совпадают с соотношениями для генераторов 3-мерной вращений группы $O(3)$.

Поэтому малые преобразования группы $SU(2)$ эквивалентны преобразованиям группы $O(3)$, причём вектор n указывает направление оси вращения, а θ — угол поворота. Но соответствие групп не однозначное, поскольку в группе $O(3)$ поворот на угол $\theta = 2\pi$ считается неотличимым от тождественного преобразования, тогда как соответствующая матрица 2×2 отличается от единичной знаком. В связи с этим говорят о дву-