

ект может быть равен себе по одним признакам и не равен по другим. Напр., распределение ядер и электронов в кристалле *антиферромагнетика* можно описать с помощью обычной пространственной симметрии, но если учесть распределение в нём магн. моментов (рис. 9),

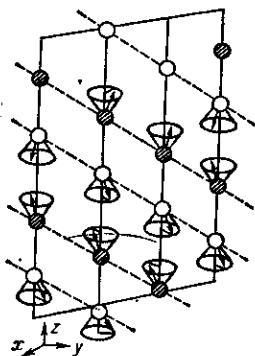


Рис. 9. Распределение магнитных моментов (стрелки) в элементарной ячейке ферромагнитного кристалла, описываемое с помощью обобщенной симметрии.

то «обычной», классич. симметрии уже недостаточно. К подобного рода обобщениям симметрии относятся *антисимметрия* и *цветная симметрия*.

В *антисимметрии* в дополнение к трём пространственным переменным x_1, x_2, x_3 вводится добавочная, 4-я переменная $x_4 = \pm 1$. Это можно истолковать таким образом, что при преобразовании (1, а) функция F может быть не только равна себе, как в (1, б), но и «антиравна» — изменит знак. Существует 58 групп точечной антисимметрии G_3^{3a} и 1651 пространственная группа антисимметрии G_3^{3a} (Шубниковские группы).

Если добавочная переменная приобретает не два значения, а больше (возможны 3, 4, 6, 8, ..., 48), то возникает т. н. *цветная симметрия* Белова. Так, известна 81 точечная группа G_3^{3c} и 2942 группы

G_3^{3c} . Осн. приложения обобщенной симметрии в кристаллографии — описание магн. структур.

Найдены и др. группы антисимметрии (кратной и др.). Теоретически выведены и все точечные и пространственные группы четырехмерного пространства и более высоких измерений. На основе рассмотрения симметрии (3 + K)-мерного пространства можно также описывать несоразмерные в трёх направлениях модулиров. структуры (см. *Несоразмерная структура*).

Др. обобщение симметрии — симметрия подобия, когда равенство частей фигуры заменяется их подобием (рис. 10), криволинейная симметрия, статистич. симметрия, вводимая при описании структуры разупорядоченных кристаллов, *твёрдых растворов, жидких кристаллов* и др.

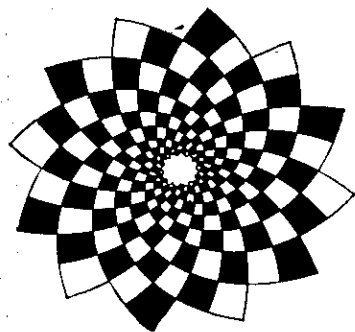


Рис. 10. Фигура, обладающая симметрией подобия.

Лит.: Шубников А. В., Копчик В. А., *Симметрия в науке и искусстве*, 2 изд., М., 1972; Федоров Е. С., *Симметрия и структура кристаллов*, М., 1949; Шубников А. В., *Симметрия и антисимметрия конечных фигур*, М., 1951; International tables for X-ray crystallography, v. 1 — Symmetry groups, Birmingham, 1952; Ковалев О. В., *Неприводимые представления пространственных групп*, К., 1961; Вейль Г., *Симметрия*, пер. с англ., М., 1968; Современная кристаллография, т. 1 — Вайнштейн Б. К., *Симметрия кристаллов. Методы структурной кристаллографии*, М., 1979; Галля и Р. В., *Кристаллографическая геометрия*, М., 1984; International tables for crystallography, v. A — Space group symmetry, Dordrecht — la. o. l., 1987. Б. К. Вайнштейн.

СИММЕТРИЯ МОЛЕКУЛ. С. м. играет фундам. роль в молекулярной спектроскопии, позволяет проводить классификацию уровней энергии молекул, определить отбора правила для молекул, существенно упростить аналитич. и численные расчёты внутр. энергий и вероятностей переходов молекул.

В наиб. общем виде С. м. определяется как группа преобразований, оставляющих полный гамильтониан молекулы инвариантным, и состоит из следующих операций:

- все перестановки координат и спинов электронов;
- любое вращение координат и спинов всех частиц (электронов и ядер) вокруг любой оси (оси симметрии), проходящей через центр масс молекулы;
- любая трансляция молекулы в пространстве;
- обращение знака всех линейных и угл. моментов, эквивалентное обращению времени;
- одноврем. инверсия координат всех частиц в центре масс;
- любая перестановка координат и спинов тождественных ядер.

Каждый из наборов этих операций составляет отдельную группу, а каждая группа симметрии гамильтониана представляет собой прямое произведение всех этих групп. При решении конкретных задач используют не все перечисленные группы. Группа (а) используется только в связи с *Паули принципом*, согласно к-рому волновая ф-ция электрона антисимметрична относительно любой перестановки электронов; группа (б) отражает закон сохранения для полного угл. момента молекулы; группа (в) для изолиров. молекулы не существенна, т. к. трансляции молекулы не влияют на волновые ф-ции, описывающие внутр. состояние молекулы; инвариантность гамильтониана относительно групп (г) и (д) показывает, что он может содержать только чётные степени угл. моментов и пространственных декартовых координат частиц.

Для молекулы наиб. важная группа (а) и прямое произведение групп (д) и (е), к-рое представляет собой т. н. *перестановочно-инверсионную* (ПИ) группу С. м. ПИ-группы введены в теорию С. м. Х. К. Лонге-Хиггинсом (H. Ch. Longuet-Higgins) в 1963. Частным случаем ПИ-групп являются точечные группы С. м. Группы (б), (в) и (г) лишь накладывают на гамильтониан молекулы определённые условия, к-рые учитываются при решении конкретных задач. Для групп С. м. применяют обозначения, заимствованные из кристаллографии (см. *Симметрия кристаллов*).

ПИ-группа симметрии молекул представляет собой прямое произведение групп перестановок тождественных ядер (E, P) на группу инверсии (E, E^*), где E — идентичная операция, E^* — инверсия, P — перестановки. ПИ-группа состоит из перестановок P тождественных ядер, перестановок с инверсией $P^* = PE^* = E^*P$ и идентичной операции E ; просто инверсия E может не быть элементом ПИ-группы. Для молекул, содержащих много тождественных ядер, размерность ПИ-группы может быть очень большой, т. к. она определяется только хим. ф-лой молекулы. Напр., полная ПИ-группа молекулы C_6H_5Cl состоит из $2 \cdot 6! \cdot 5! \cdot 1! = 2 \cdot 720 \cdot 120 \cdot 1 = 172\ 800$ операций, и очевидно, что такая группа для практич. целей бесполезна. Лонге-Хиггинс предложил постулат, согласно к-рому из полной группы выбирается подгруппа, элементы к-рой соответствуют физически возможным операциям. Физически невозможными считаются операции, отвечающие разрыву хим. связей, и операции переходов между равновесными конфигурациями молекул, разделёнными высокими потенциальными барьерами. После исключения таких физически невозможных операций