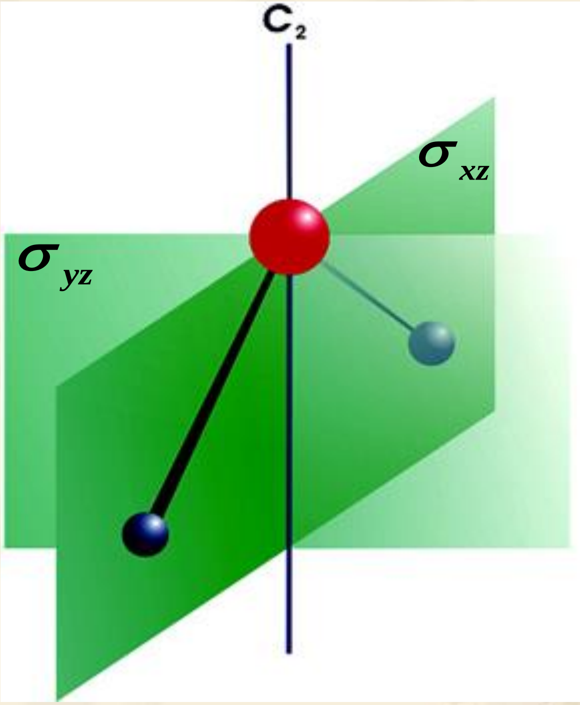
4.2 对称操作群 对称元素的组合

一个对称元素对应多个对称操作，所有这些对称操作的集合，满足一些特殊的规则，即满足构成**群**的要求。

H_2O(三个原子xz平面上)



4.2.1 群的定义

G是一集合，对于其中元素规定了运算规则，称为乘法，若满足下面条件，则集合G就构成一个群：

I. 封闭性：G中任意两个元素A和B的乘积AB仍然是G中的一个元素。

II. 结合律：G中任意三个元素A, B和C，其乘积满足$(AB)C=A(BC)$。

III. 单位元：G中存在唯一单位元E，对于G中任意元素A满足关系式$A=AE=EA$。

IV. 逆元：对于G中任意元素A，存在唯一元素，记为A^{-1}，使得$AA^{-1}=A^{-1}A=E$，称A^{-1}为A的逆元。

上述群的定义有冗余，不符合公理化要求，但为方便起见，我们仍采用上述定义！书中定义不确切。

（了解一下：群定义的冗余部分及其证明）

前述群的定义中有四个冗余部分：

1. 逆元定义只需要$AA^{-1}=E$和$A^{-1}A=E$中的一个。
2. 单位元定义只需要$AE=A$和$EA=A$中的一个。
3. 不需要在定义中指定逆元唯一。
4. 不需要在定义中指定单位元唯一。

定义中多余的性质可以由定义其余部分证明得到。

1. 若$AA^{-1}=E$，则$A^{-1}A=E$。

证明：由群的定义，任意元素有逆元，记A^{-1}的逆元为S。由$AA^{-1}=E$，在上式两边同时左乘A^{-1}，上式变为$A^{-1}AA^{-1}=A^{-1}E=A^{-1}$，再在前式两边同时右乘$S$得$A^{-1}AA^{-1}S=A^{-1}S$，由逆元定义知$A^{-1}S=E$，则前式变为$A^{-1}AE=E$，再由结合律和单位元定义得$A^{-1}A=E$。

（了解一下：群定义的冗余部分及其证明）

2．若$AE=A$，则$EA=A$。

证明：在$AA^{-1}=E$两边同时右乘A，得$AA^{-1}A=EA$，将前面证得的第1条性质$A^{-1}A=E$代入前式左边，得$AE=EA$，再由单位元定义知$AE=A$，则$A=EA$。

3．逆元唯一。

证明：设S为A的另一逆元，则由逆元的定义可知$E=AS=AA^{-1}$，在上式第二个等号$AS=AA^{-1}$两边同时左乘A^{-1}，得$A^{-1}AS=A^{-1}AA^{-1}$，用结合律并代入第1条$A^{-1}A=E$，得$ES=EA^{-1}$，再由第2条得$S=A^{-1}$。

4．单位元唯一。

证明：设E'是另一单位元，则对于G中任一元素A，由第2条和单位元定义$A=EA=E'A$，在$EA=E'A$两边同时右乘A^{-1}，$EAA^{-1}=E'AA^{-1}\rightarrow EE=E'E$，得$E=E'$。

阶：群中元素的个数。如果群的阶为有限大小，此群称为有限群，否则为无限群。

例：所有**非零**实数关于普通乘法构成群，这里把普通乘法作为群的乘法，单位元为整数1，互为倒数的一对实数互为逆元。这是一个“不可数”无限群。

例：所有有理数关于普通加法构成群，这里把普通加法作为群的乘法，单位元为整数0，互为相反数的一对有理数互为逆元。这是一个“可数”无限群。

例：{1, –1}关于普通乘法构成群，阶为2，是有限群；{1, –1, i, –i}关于普通乘法也构成群，阶为4，也是有限群。

♣一个物体的所有对称操作构成群。

证明：

1. 实施两次对称操作后物体复原，说明两次对称操作的乘积仍然是一个对称操作，即操作关于乘法是封闭的；
2. 不妨设对称操作C将点P移至P′，操作B将点P′移至P″，操作A将P″移至P‴，则操作BC相当于将点P移至P″，操作AB相当于将点P′移至P‴，则操作经BC再经A，与操作经C再经AB，结果相同，即对称操作满足结合律；
3. 恒等操作就是单位元；
4. 每个对称操作都可以反过来进行，即存在逆元。

♣一个对称元素对应的所有操作构成群。

一个对称元素对应的所有操作中，总可以找到一个生成元，由生成元反复多次实施，则可产生其它所有对称操作，这些操作构成群。记生成元为$\hat{A}$，其周期为$\boldsymbol{n}$，显然，集合 $\{\hat{A}, \hat{A}^2, \hat{A}^3, \cdots, \hat{A}^n = \hat{E}\}$ 满足群的要求（这种群又称为循环群）。

例：对称元素反轴$\boldsymbol{I_4}$，操作$\boldsymbol{\hat{I}_4}$周期为4，由它生成的所有对称操作构成$\boldsymbol{I_4}$群：

$$I_4 = \{\hat{I}_4^1, \hat{I}_4^2, \hat{I}_4^3, \hat{I}_4^4 = \hat{E}\}$$

♣注意符号的含义：一个对称元素对应的所有对称操作构成群，一般就用这个对称元素的符号作为群的符号。

例：对称元素C_n轴，其生成元之一为 $\hat{C}_n^1$，由生成元生成的所有操作构成群，它也记为C_n，称为C_n群：

$$C_n=\{\hat{E},\hat{C}_n^1,\hat{C}_n^2,\cdots,\hat{C}_n^{n-1}\}$$

则符号C_n有两重含义：

1. 对称元素；
2. 此对称元素的所有对称操作构成的群。

子群：如果群G的一个子集H关于群G的乘法也构成一个群，那么H称为G的子群。

群G的单位元单独构成G的一个子群，群G本身也构成G的一个子群，这两个子群称为**平凡子群**。

性质：有限群G的阶是其子群的阶的整数倍。
推论：若群G的阶是素数，则G没有非平凡子群。

证明需要用到群的其它概念，参考：徐光宪等，《量子化学》第二版（上册），第6章，科学出版社，2009年。

例：C_2群是C_6群的一个子群，C_6群的阶是6，C_2群的阶是2，2是6的一个因数。

如果颠倒任意两个群元乘积的次序，结果都不变，这样的群称为阿贝尔群。（等同于两个算符对易）

例：所有实数关于普通加法构成群，其中所有有理数构成其一个子群，所有偶数又构成有理数群的子群。它们都是无限群，也都是阿贝尔群。

例：对于对称元素C_6轴，由操作$\hat{C}_6$生成的所有对称操作构成一个群，记为：$C_6=\{\hat{E},\hat{C}_6^1,\hat{C}_6^2,\hat{C}_6^3,\hat{C}_6^4,\hat{C}_6^5\}$，其中$\{\hat{E},\hat{C}_6^2,\hat{C}_6^4\}$构成一个三阶子群，$\{\hat{E},\hat{C}_6^3\}$构成一个二阶子群。它们都是阿贝尔群。

例：恒等操作$\hat{E}$和反演操作$\hat{i}$与所有点操作对易，原因是它们的表示矩阵是常数矩阵，等同于数。

4.2.2 有限群的乘法表

群对于乘法运算封闭，如果任意两个群元的乘积都已知，那么群的性质也就清楚了——乘法表。

列元素
列操作

行操作
行元素

$$
\begin{array}{c|ccccc}
 & E & a_1 & a_2 & a_3 & \cdots \\
\hline
E & E & a_1 & a_2 & a_3 & \cdots \\
a_1 & a_1 & a_1a_1 & a_1a_2 & a_1a_3 & \cdots \\
a_2 & a_2 & a_2a_1 & a_2a_2 & a_2a_3 & \cdots \\
a_3 & a_3 & a_3a_1 & a_3a_2 & a_3a_3 & \cdots \\
\vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots
\end{array}
$$

注意列操作和行操作的定义！

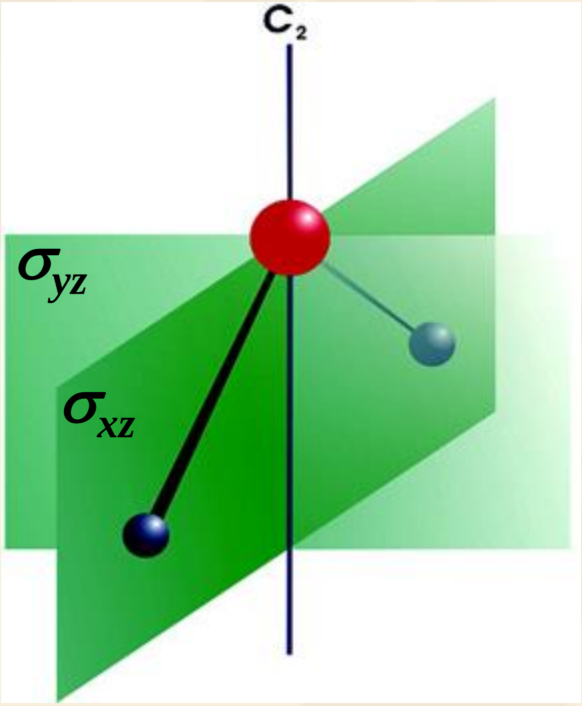
推算乘法表时，应注意：

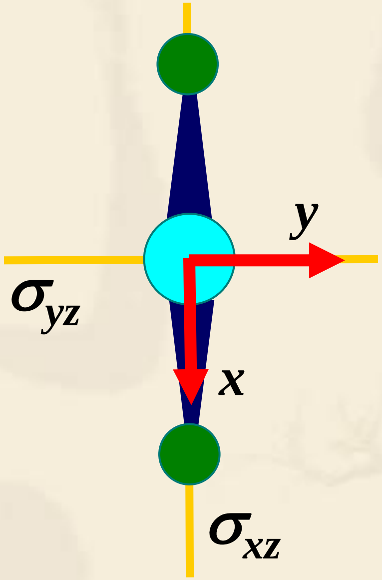
1. 对称操作的对象是分子中各原子，进行操作时，对称元素保持不动，让原子移动。用矩阵语言就是：对称操作的表示矩阵不变，坐标(x, y, z)变；

2. 在数学表达式中，我们默认操作的对象放在操作符号的右边，所以连续的多个操作应按从右往左的顺序进行（与连续多个算符作用在波函数上类似），例如：对称操作AB作用在某个对象 f 上，ABf，则首先应进行操作B，其后进行操作A；

3. 乘法表中，列操作放在行操作的右边，也就是先实施列操作，后实施行操作。

例：H_2O(三个原子都在*xz*平面上)

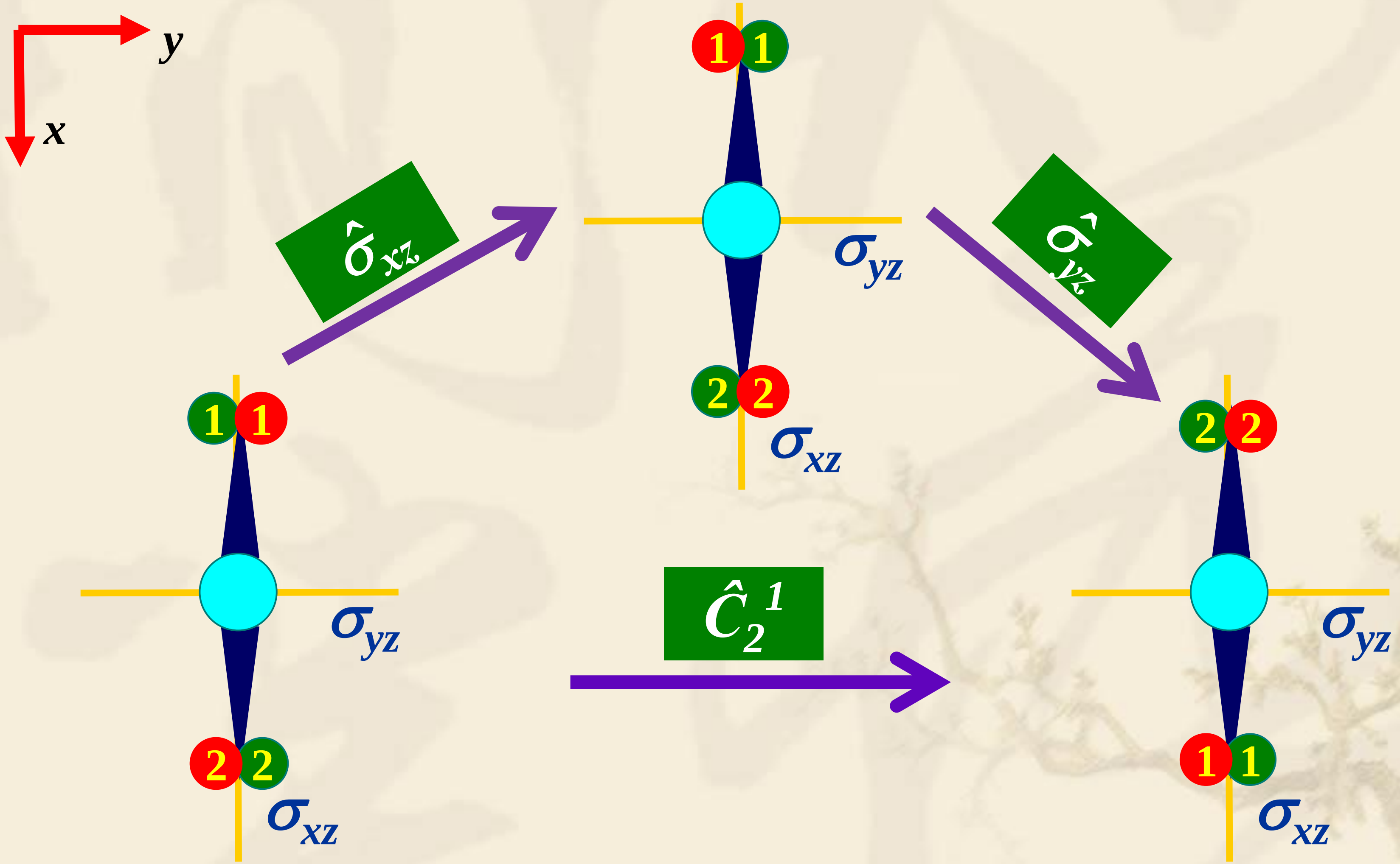




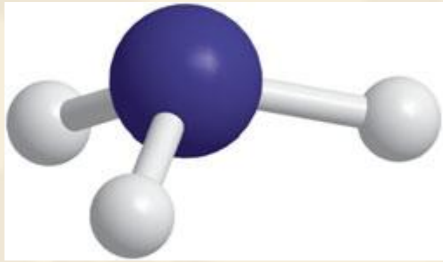
C_{2v} 群的乘法表（对称操作乘法表）

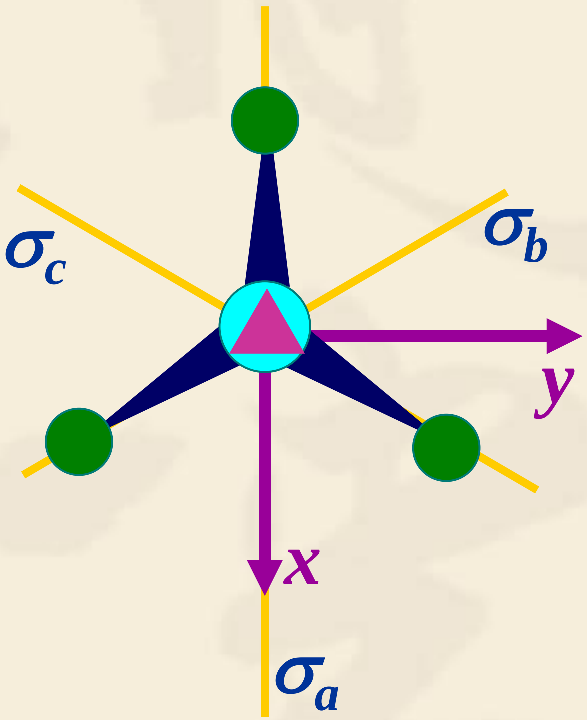
C_{2v}	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$
$\hat{C}_2^1$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{E}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$
$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$
$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{E}$

例： $\hat{\sigma}_{yz}\hat{\sigma}_{xz} = \hat{C}_2^1$



NH_3

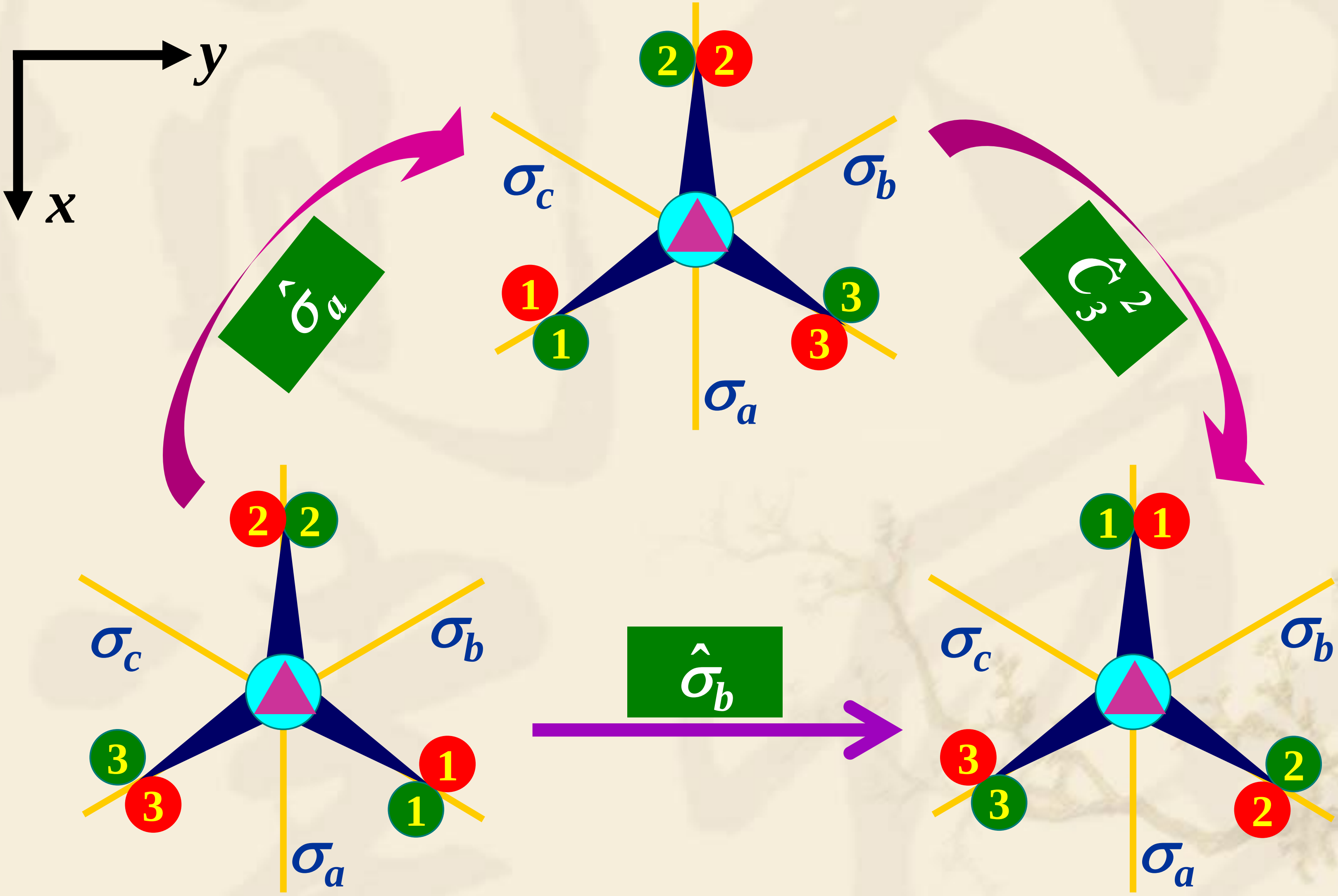




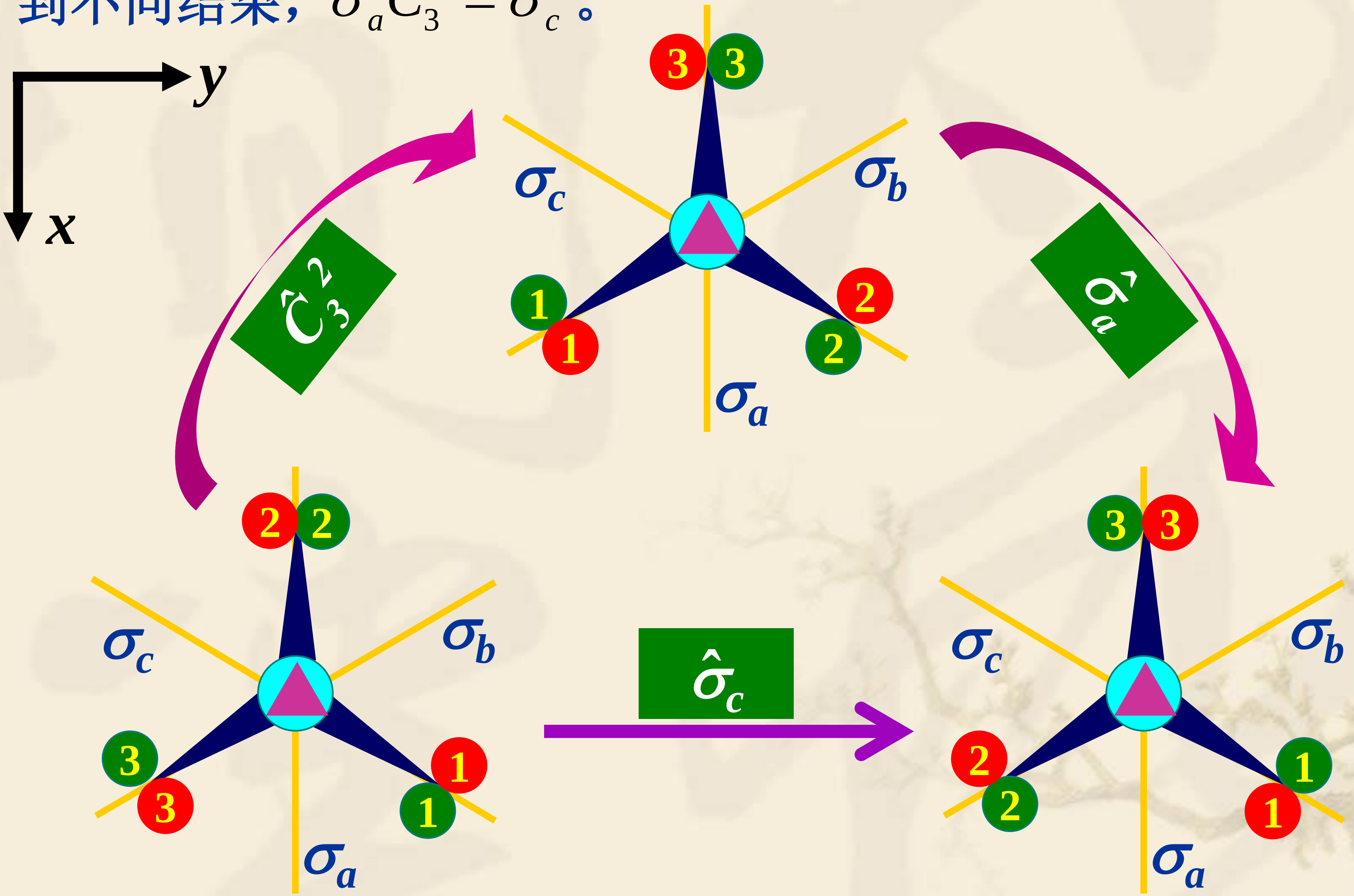
C_{3v} 群的乘法表

C_{3v}	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$
$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$
$\hat{C}_3^2$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$
$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$
$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$
$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$

例：$\hat{C}_3^2\hat{\sigma}_a=\hat{\sigma}_b$



C_{3v}是最简单的非阿贝尔群，把前例操作顺序反过来，将得到不同结果，$\hat{\sigma}_a\hat{C}_3^2=\hat{\sigma}_c$ 。



重排定理：记群$G = \{E, A_1, A_2, A_3, \ldots\ldots\}$，任意取一个元素$A_i$，则集合$A_iG = \{A_iE, A_iA_1, A_iA_2, A_iA_3, \ldots\ldots\}$与$G$相同。类似的，集合$GA_i$也与$G$相同。

证明：只要证明$A_iG \subset G$和$G \subset A_iG$均成立，即证明A_iG中任意元素属于G，G中任意元素也属于A_iG。

对于A_iG中任意元素A_iA_k，$A_i \in G$，$A_k \in G$，因群G关于乘法封闭，A_iA_k必属于G，则$A_iG \subset G$。

对于G中任意元素A_k，由乘法封闭性和存在逆元知，$A_i^{-1}A_k$必是G中的一个元素，记其为A_m，则$A_k = A_iA_m$，因此，$A_k \in A_iG$，则$G \subset A_iG$。

推论：乘法表任意一行或任意一列没有重复元素。

4.2.3 对称元素的组合

由于分子对称性高低不同，分子中既可能只有个别类型的对称元素，也可能是多种对称元素共同存在，分子中的两种对称元素还可能组合导出第三种对称元素。

分子是有限图形（封闭图形），参加组合的所有对称元素必通过至少一个公共点（点操作，点群名称的由来）。

对称元素组合原则

- 两根成π/n角C_2轴的组合：必然产生C_n轴
- 主轴与C_2轴的组合：必然产生n个等价的C_2轴
- 两个成π/n角镜面的组合： 两者交线必为C_n轴
- 主轴与平行镜面的组合：必然产生n个镜面
- 偶次轴与对称中心或垂直此轴的对称面的组合：

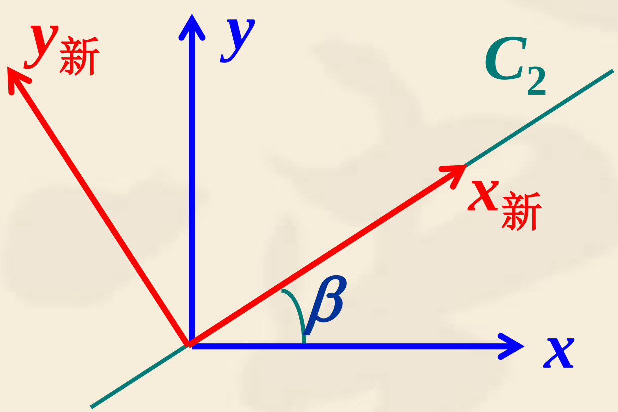
一个偶次轴与对称中心的组合，必产生一垂直此轴的镜面；(4.1节已证 $\hat{\sigma}_{xy}=\hat{i}\hat{C}_2^1=\hat{i}\hat{C}_n^{n/2}$)

对称中心与镜面组合，必产生一垂直此面的二次轴。($\hat{\sigma}_{xy}=\hat{i}\hat{C}_2^1 \xrightarrow{\text{两边同时左乘}\hat{i}} \hat{i}\hat{\sigma}_{xy}=\hat{C}_2^1$)

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

例：有一根C_2轴在xy平面上并与x轴成β角，求绕这根轴转动180°的表示矩阵。

解：建立新坐标系，z轴不变，使新x轴与转轴重合。与绕z轴旋转180°的表示矩阵类比，很容易看出在新坐标系中绕新x轴转动180°的表示矩阵的形式。

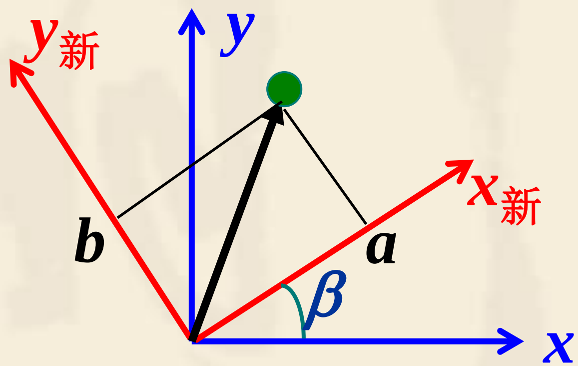


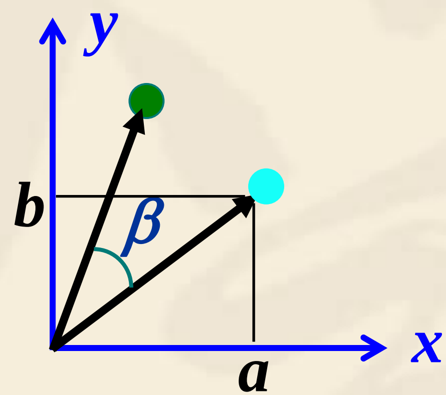
$$\mathbf{D}(z轴,\hat{C}_2^1)=\begin{pmatrix}-1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$\boxed{\mathbf{D}_{新}(新x轴,\hat{C}_2^1)=\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

接前页。新坐标系相当于将旧坐标系绕z轴转β角，效果等同于让物体在旧坐标系中绕z轴转$-\beta$角：





物体在新坐标系中的坐标等于使物体在旧坐标系中绕z轴转动$-\beta$角后的坐标：

$$\begin{pmatrix} x_{新} \\ y_{新} \\ z_{新} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\beta & \sin\beta & 0 \\ -\sin\beta & \cos\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\boxed{\mathbf{r}_{新} = \mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

接前页。转动前物体在新、旧坐标系中的坐标分别记为$\mathbf{r}_{新},\mathbf{r}$，转动后分别为$\mathbf{r}'_{新},\mathbf{r}'$，由新旧坐标关系知

$$\mathbf{r}_{新}=\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}\qquad \mathbf{r}'_{新}=\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}'$$

在新坐标系中，待考察的转动操作为：

$$\mathbf{r}'_{新}=\mathbf{D}_{新}\mathbf{r}_{新}$$

将 $\mathbf{r}_{新}=\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}$ 和 $\mathbf{r}'_{新}=\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}'$ 代入 $\mathbf{r}'_{新}=\mathbf{D}_{新}\mathbf{r}_{新}$，得：

$$\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}'=\mathbf{r}'_{新}=\mathbf{D}_{新}\mathbf{r}_{新}=\mathbf{D}_{新}\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}$$

$$\longrightarrow \mathbf{r}'=\underbrace{\mathbf{D}^{-1}(\hat{C}(-\beta))}_{=\,\mathbf{D}(\hat{C}(\beta))}\mathbf{D}_{新}\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}$$

$$\boxed{\therefore\quad \mathbf{r}'=\mathbf{D}(\hat{C}(\beta))\mathbf{D}_{新}\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

接前页。 $\mathbf{r}' = \mathbf{D}(\hat{C}(\beta))\mathbf{D}_{\text{新}}\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta))\mathbf{r}$

而在旧坐标系中，待考察转动操作为： $\mathbf{r}' = \underline{\mathbf{D}}\mathbf{r}$

矩阵**D**的表达式正是待求的

将两者比较，得：$\mathbf{D}(\hat{C}(\beta))\mathbf{D}_{\text{新}}\mathbf{D}(\hat{C}(-\beta)) = \mathbf{D}$

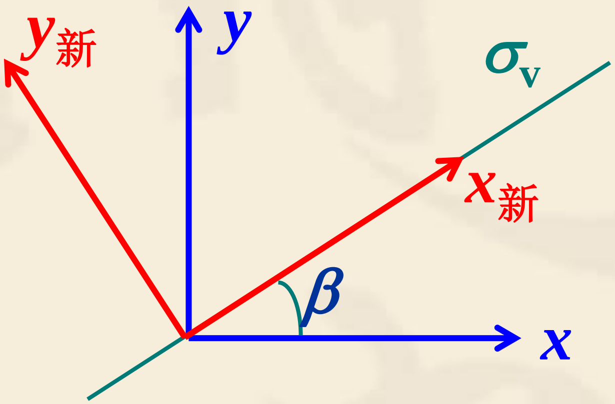
将已知的矩阵$\mathbf{D}_{\text{新}}$和$\mathbf{D}(\hat{C}(\pm\beta))$代入上式，计算后得

$$\boxed{\mathbf{D}(\text{轴与}x\text{轴成}\beta\text{角},\hat{C}_2^1) = \begin{pmatrix} \cos 2\beta & \sin 2\beta & 0 \\ \sin 2\beta & -\cos 2\beta & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

例：垂直于*xy*平面并与*x*轴成*β*角有一镜面，求关于此镜面反映的表示矩阵。

解： 仿照前例，建立新坐标系，使新*xz*面与镜面重合。在新坐标系中很容易得到表示矩阵：



$$\mathbf{D}_{\text{新}}(\hat{\sigma}_{\text{v}}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

使用与前例完全相同的方法，得：

$$\boxed{\mathbf{D}(\text{镜面与}x\text{轴成}\beta\text{角}, \hat{\sigma}) = \begin{pmatrix} \cos 2\beta & \sin 2\beta & 0 \\ \sin 2\beta & -\cos 2\beta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

求证：两根成π/n角的C_2轴组合得垂直于它们的C_n轴。

证明：将x轴建立在一根C_2轴上，使z轴垂直于两根C_2轴，如此另一根C_2轴在xy平面上，则

$$\mathbf{D}(x\text{轴},\hat{C}_2^1)\times\mathbf{D}(\text{轴与}x\text{轴成}\beta\text{角},\hat{C}_2^1) =$$

$$\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos 2\beta & \sin 2\beta & 0\\ \sin 2\beta & -\cos 2\beta & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos 2\beta & \sin 2\beta & 0\\ -\sin 2\beta & \cos 2\beta & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}$$

$$= \mathbf{D}(z\text{轴},\hat{C}_n^1)$$

其中$\beta=\dfrac{\pi}{n}$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

求证：主轴和垂直于主轴的C_2轴组合得其它C_2轴。

证明：将坐标系z轴与主轴重合，并将x轴建立在待考察的C_2轴上，则

$$\mathbf{D}(z\text{轴},\hat{C}_n^1)\times\mathbf{D}(x\text{轴},\hat{C}_2^1)=$$

$$\begin{pmatrix}\cos\alpha & -\sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & 1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 0 & 0\\ 0 & -1 & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos\alpha & \sin\alpha & 0\\ \sin\alpha & -\cos\alpha & 0\\ 0 & 0 & -1\end{pmatrix}$$

$$=\mathbf{D}(\text{轴与}x\text{轴成}\frac{\alpha}{2}\text{角},\hat{C}_2^1)$$

$$\text{其中}\alpha=\frac{2\pi}{n}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

求证：两个成π/n角的镜面组合得平行于镜面的C_n轴。

证明：将一个镜面与xz面重合，另一个镜面过z轴并与x轴成π/n角，则

$$\mathbf{D}(\hat{\sigma}_{xz})\times\mathbf{D}(\text{镜面与}x\text{轴成}\beta\text{角},\hat{\sigma}_{\mathrm{v}})=$$

$$\begin{pmatrix}1&0&0\\0&-1&0\\0&0&1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}\cos2\beta&\sin2\beta&0\\\sin2\beta&-\cos2\beta&0\\0&0&1\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}\cos2\beta&\sin2\beta&0\\-\sin2\beta&\cos2\beta&0\\0&0&1\end{pmatrix}$$

$$=\mathbf{D}(z\text{轴},\hat{C}_n^1)$$

$$\text{其中}\beta=\frac{\pi}{n}$$

了解一下：用表示矩阵证明对称元素的组合

求证：主轴和平行于主轴的镜面组合得其它镜面。

证明：将坐标系z轴与主轴重合，并将待考察镜面放在xz平面上，则

$$\mathbf{D}(z\text{轴},\hat{C}_n^1) \quad \times \quad \mathbf{D}(\hat{\sigma}_{xz}) \quad =$$

$$\begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & \sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & -\cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

$$=\mathbf{D}(\text{镜面与}x\text{轴成}\frac{\alpha}{2}\text{角},\hat{\sigma}_{\mathrm{v}})$$

$$\text{其中}\alpha = \frac{2\pi}{n}$$

例：两个成90°的镜面组合得到C_2轴。

C_{2v} 群的乘法表

C_{2v}	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$
$\hat{C}_2^1$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{E}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$
$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2^1$
$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{xz}$	$\hat{\sigma}_{yz}$	$\hat{C}_2^1$	$\hat{E}$

$\{\hat{E}, \hat{\sigma}_{yz}\}$和$\{\hat{E}, \hat{\sigma}_{xz}\}$都是$C_{2v}$的子群，$\hat{\sigma}_{yz}$和$\hat{\sigma}_{xz}$分别是这两个子群的生成元。

由乘法表$\hat{\sigma}_{yz}\cdot\hat{\sigma}_{xz} = \hat{C}_2$，说明镜面$\hat{\sigma}_{yz}$和$\hat{\sigma}_{xz}$组合得到了对称元素$C_2$，因此$C_{2v}$的所有元素可以由$\hat{\sigma}_{yz}$和$\hat{\sigma}_{xz}$生成。

例：C_3轴和平行于它的镜面组合得到另外2个平行轴的镜面。

C_{3v} 群的乘法表

C_{3v}	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$
$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$
$\hat{C}_3^2$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$
$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$
$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$	$\hat{C}_3^1$
$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_c$	$\hat{\sigma}_a$	$\hat{\sigma}_b$	$\hat{C}_3^1$	$\hat{C}_3^2$	$\hat{E}$

$\{\hat{E}, \hat{\sigma}_a\}$和$C_3$都是$C_{3v}$的子群，$\hat{\sigma}_a$和$\hat{C}_3$分别是这两个子群的生成元。由乘法表$\hat{\sigma}_a \cdot \hat{C}_3 = \hat{\sigma}_b$，说明镜面$\sigma_a$和主轴$C_3$组合可产生镜面$\sigma_b$，同理也可产生$\sigma_c$，因此，$C_{3v}$的所有元素可以由$\hat{\sigma}_a$和$\hat{C}_3$生成。

（了解一下：一个对称元素与另两个对称元素的组合等价）

两个群的直积：某个群中含有两个子群G和H，分别记为$G=\{E, g_1, g_2, \ldots\}$，$H=\{E, h_1, h_2, \ldots\}$，这两个子群只有唯一的共同元素——单位元$E$，且两个子群之间的元素相乘是互易的，即 $g_i h_k = h_k g_i$，则由两个子群的元素两两相乘构成的集合还是一个群，称为G和H的直积，记为$G\otimes H$ 。

由两个子群间的乘法对易知：$G\otimes H = H\otimes G$。

取H的单位元E乘以G中所有元素，显然结果仍为G，因此，$G \subset G\otimes H$，同理，$H \subset G\otimes H$。

$$G\otimes H=\{E, g_1, g_2,\ldots, h_1, h_2,\ldots, g_1h_1, g_1h_2,\ldots, g_ih_k,\ldots\}$$

（了解一下：一个对称元素与另两个对称元素的组合等价）

例： $C_4=\{\hat{E},\hat{C}_4^1,\hat{C}_4^2,\hat{C}_4^3\}$　　$C_i=\{\hat{E},\hat{i}\}$

$$C_4\otimes C_i=\{\hat{E},\hat{C}_4^1,\hat{C}_4^2,\hat{C}_4^3,\hat{i},\hat{i}\hat{C}_4^1,\hat{i}\hat{C}_4^2,\hat{i}\hat{C}_4^3\}$$

$$I_4=\{\hat{E},\hat{I}_4^1,\hat{I}_4^2,\hat{I}_4^3\}=\{\hat{E},\hat{i}\hat{C}_4^1,\hat{C}_4^2,\hat{i}\hat{C}_4^3\}$$

$\therefore I_4\subset C_4\otimes C_i$　　I_4不是 C_4和 i 的组合。

例： $C_i=\{\hat{E},\hat{i}\}$　　$C_3=\{\hat{E},\hat{C}_3^1,\hat{C}_3^2\}$

$$C_i\otimes C_3=\{\hat{E},\hat{C}_3^1,\hat{C}_3^2,\hat{i},\hat{i}\hat{C}_3^1,\hat{i}\hat{C}_3^2\}=I_3$$

I_3等价于C_3和 i 的组合

例：绕同一根轴转，$C_3=\{\hat{E},\hat{C}_3^1,\hat{C}_3^2\}$，$C_2=\{\hat{E},\hat{C}_2^1\}$

$\because \hat{C}_3^1=\hat{C}_6^2$，$\hat{C}_3^2=\hat{C}_6^4$，$\hat{C}_2^1=\hat{C}_6^3$

$$\therefore C_3\otimes C_2=\{\hat{E},\hat{C}_6^1,\hat{C}_6^2,\hat{C}_6^3,\hat{C}_6^4,\hat{C}_6^5\}=C_6$$

C_6等价于C_3和C_2的组合