群论与分子对称性

董若扬

（北京理工大学计算机学院 计算机科学与技术专业）

摘 要：群论是研究群的基本特性以及应用的数学理论,也是近代数学的一个分支。在离散数学教学中,教师往往利用常见分子的对称操作引入群的概念,同时,在研究多原子分子和复杂晶体的构造与特性时,群论的使用也十分重要。对称性研究是一个范围广泛的、内容深入的、历史悠久的、可持续发展的科学研究内容,也带来了科学研究中新的思想。群论是一个处理对称性的重要数学工具。它可以用统一的表达方式来描述对称律。用群论表达分子对称性，可以简洁地描述分子构型，有助于正确理解分子结构和性质，简化分子构型的确定流程，指导化学合成工作。

关键词：群论；分子对称性；分子点群；对称操作；

Group Theory and Molecular Symmetry

DONG Ruo-yang

(Computer science and technology, School of computer science,
Beijing University of Technology)

Abstract: Group theory is a mathematical theory that studies the properties and applications of groups. It is a branch of modern mathematics. In the teaching of discrete mathematics, the concept of group is often introduced through the symmetrical operation of common molecules. At the same time, the application of group theory is very important in the study of the structure and properties of polyatomic molecules and crystals. Symmetry is a universal, profound, long-standing and developing scientific content, which endows scientific research with new ideas. Group theory is a mathematical tool to deal with symmetry. It can describe the law of symmetry in a unified way. Using group theory to express molecular symmetry can concisely describe molecular configuration, help to correctly understand molecular structure and properties, simplify the determination process of molecular configuration, and guide chemical synthesis.

Keyword: Group theory; Molecular symmetry; Molecular point group; Symmetrical operation;

正 文:

1 群论

群论思想的产生和发展，对数学产生了重大的影响，它使代数研究进入了新的时代, 即从局部性研究转向系统结构的整体性分析研究的阶段，把现代数学理论发展抽象到新的层面。群论的思想还向各门数学分支,自然科学渗入,群论提出的结构分析思路是经典的现代数学思想,运用群论的思想方法可以解答一些错综复杂的数学问题,开拓新的数学研究领域，同时，群论也提供了一个研究自然科学的强大工具。[1]

1.1 群的定义

群是群元素 A，B，C，…等的集合，通常用符号 G 表示:G:{A，B，C，…}

群中的元素必须满足下面四个条件:

(1)封闭性

同一群中的群元素 A，B，C，…等任意两个或多个的乘积，必为群中的一个元素。

(2)单位元（幺元）

每个群 G 中都有且只有一个单位元（幺元）E，群中任意一个元素和它相乘，所得结果仍为该元素，即 $E\cdot A=A\cdot E=A$

(3)逆元

群 G 中每一个元素 A 均存在逆元 A^{-1}。对于对称操作群，每一操作 A 均存在相应的逆操作 A^{-1}，A^{-1} 可以将 A 的操作恢复。所以 $A\cdot A^{-1}=A^{-1}\cdot A=E$

(4)结合律

三个群元素相乘满足:$A(BC)=(AB)C$

1.2 所用到的关于群的一些术语

(1)阶

群元素的数目是有限的群称为有限群。有限群中元素的个数称为阶。

(2)子群

子群指群 G 中的一部分元素的集合 H 也满足群的四个条件所构成的群。通常称群 H 为群 G 的子群，G 称为 H 的母群。根据拉格朗日定理，子群的阶一定是母群的阶的一个因子。

(3)交换群（阿贝尔群）

若群 G 中群元素的乘法都满足交换律，即 $A\cdot B=B\cdot A$，则称 G 为交换群或阿贝尔群(Abelian group)。

(4)循环群

若群 G 的每一个群元素是某一元素 A 的幂 A^K，K 是整数，则群 G 称为循环群，称 A 为 G 的生成元素。满足 $A^n=E$ 的最小正整数 n 称为群 G 的阶。

1.3 所用到的关于群的一些性质

设 G 是一个群，则：

（1）单位元是唯一的

（2）任意一个元素的逆元是唯一的

（3）G 满足消去律（左消去和右消去）

（4）任意一个元素的逆元的逆元是其本身，即$\forall A\in G$，$(A^{-1})^{-1}=A$

（5）对$\forall A，B\in G$，$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1}$

2 分子对称性

2.1 简介

在分子中，原子可视作固定在它们的平衡位置，它们的空间排列是对称的。运用对称性原理来探索分子的结构进而预测分子的性质，既是人们理解分子的重要途径之一，也是理解分子结构和性质的不可或缺的方法。分子对称性连接了分子结构和分子性质，是两者关联密不可分的重要桥梁之一。

2.2 对称元素

旋转轴：分子绕轴旋转一周与，原先分子有 n 次重合，则此轴称为 n 重旋转轴，简写为 C_n。例如，水分子（H_20）有一个 C_2 轴; 氨分子（NH_3）有一个 C_3 轴。一个分子可以包含多个旋转轴；n 值最大的旋转轴称作主轴，一般设为空间直角坐标系的 z 轴，其余的称作副轴。$n\geq3$

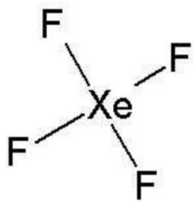
的轴称为高次轴。

对称面：当一个分子以一个平面对称变换后，其构型无法与原始分子的构型区分时，这个平面称为对称面。对称平面也称为镜面，记为σ。例如，水分子包含两个对称平面：一个平面位于水分子本身的平面内，另一个平面垂直于分子中心。包含主轴且垂直于分子平面的对称平面称为垂直镜面，记为 σ_v；垂直于主轴的对称面则称作水平镜面，记为 σ_h。等分两个相邻副轴夹角的镜面称作等分镜面，记作 σ_d。

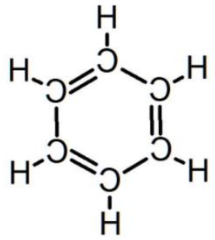
对称中心：如果一条直线从分子中的任何一个原子延伸到分子的中心，并且有一个相同的原子与另一侧的距离相等，也就是说，整个分子围绕某一点的中心对称，那么这个中心称为对称中心，用 i 表示。对称中心可以是原子，也可以是空的。例如四氟化氙（XeF_4）的对称中心是中心的 Xe 原子，苯（C_6H_6）的对称中心位于苯环的几何中心（不存在原子）。

旋转反映轴：此操作是旋转和反映的复合操作。分子围绕选择轴旋转一定角度，然后反映垂直于选择轴的平面，所得到的分子等价于于原始分子，记为 S_n。例如，有四面体型的含有三个 S_4 轴的四氟化硅，以及有一个 S_6 轴的乙烷的交叉式构象。[2]

恒等元素：简写为 E（Einheit）。恒等操作是一种不会改变分子的操作，存在于每个分子中。它是分子对称运算群中最重要的元素。



XeF_4



苯

2.3 对称操作的矩阵表示

对称操作可理解为各原子在固定的坐标系中进行变换。所以进行对称操作后，原来各原子的坐标位置(x，y，z)变换为新的坐标位置(x’，y’，z’)，这种操作过程可用变换矩阵 W 表示。

恒等操作 E 的新旧坐标相同，所以

$$E = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$$

当对称中心处于原点(0，0，0)，进行反演操作，将处于(x，y，z)点的坐标变换为(-x，-y，-z)，i 的表示矩阵为:

$$i = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}$$

在直角坐标系中，若镜面和 xy 平面平行并通过原点，反映操作 σ_{xy} 的表示矩阵为:

$$\sigma_{xy} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

C_3轴有 3 种操作:C_3^1，C_3^2，C_3^3=E。若取 z 轴为C_3轴，C_3^1，C_3^2的表示矩阵为:

$$C_3^1 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad C_3^2 = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

一般地，C_n轴的对称操作的表示矩阵为:

$$C_n^k = \begin{bmatrix} \cos(2k\pi/n) & -\sin(2k\pi/n) & 0 \\ \sin(2k\pi/n) & \cos(2k\pi/n) & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

映轴 S_n的对称操作是个复合操作，例如通过原点和 z 轴平行的映轴 S_4的对称操作S_n^1的表示矩阵为:

$$S_4^1 = \sigma_{xy} \cdot C_4^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

可以证明 $\sigma_{xy} \cdot C_4^1 = C_4^1 \cdot \sigma_{xy}$，即这种复合操作是可交换的，按同样的方法可得$S_4^3$的表示矩阵为:

$$S_4^3 = (\sigma_{xy} \cdot C_4^1)^3 = \sigma_{xy} \cdot C_4^3 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} = S_4^{-1}$$

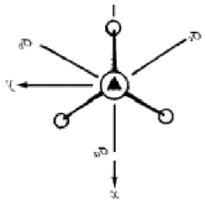
和映轴相似，反轴 I_n的对称操作也是个复合操作。通过原点和 z 轴平行的反轴 I_4的对称操作I_4^1的表示矩阵为:

$$I_4^1 = i \cdot C_4^1 = \begin{bmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 0 & -1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 0 & 1 & 0 \\ -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{bmatrix}$$

将I_4^1和S_4^{-1}(即S_4^3)的表示矩阵进行对比，可发现两者是相同的。按这种方法将反轴和映轴的对称操作进行对比，可以得出结论:反轴 I_n和映轴 S_n是互有联系互相包含的。它们和其他对称元素的关系如下:

$I_1=S_2^{-1}=i$	$S_1=I_2^{-1}=\sigma$	$I_2=S_1^{-1}=\sigma$	$S_2=I_1^{-1}=i$
$I_3=S_6^{-1}$=C3+i	$S_3=I_6^{-1}=C_3+\sigma$	$I_4=S_4^{-1}$	$S_4=I_4^{-1}$
$I_5=S_{10}^{-1}=C_5+i$	$S_5=I_{10}^{-1}=C_5+\sigma$	$I_6=S_3^{-1}=C_3+\sigma$	$S_6=I_3^{-1}=C_3+i$

2.4 对称操作的乘法



如图 NH_3 分子的结构及分子中存在的对称元素。由图可见，NH_3 分子中具有 C_3 对称轴及 3 个镜面 σ_a，σ_b，σ_c 等对称元素。这些对称元素相应的对称操作为:E，C_3^1，C_3^2，σ_a，σ_b，σ_c 我们可以将一个操作看成是两个操作相乘的结果，例如 $C_3^1 \bullet \sigma_a = \sigma_c$， $\sigma_a \bullet \sigma_b = C_3^1$。

$$C_3^1 \cdot \sigma_a = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv \sigma_c$$

$$\sigma_a \cdot C_3^1 = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \equiv \sigma_b$$

3 对称操作群

3.1 以 NH_3 为例验证对称操作构成一个群 C_{3v}={E，C_3^1，C_3^2，σ_a，σ_b，σ_c}

（1）封闭性

C_{3v}	E	C_3^1	C_3^2	σ_a	σ_b	σ_c
E	E	C_3^1	C_3^2	σ_a	σ_b	σ_c
C_3^1	C_3^1	C_3^2	E	σ_c	σ_a	σ_b
C_3^2	C_3^2	E	C_3^1	σ_b	σ_c	σ_a
σ_a	σ_a	σ_b	σ_c	E	C_3^1	C_3^2
σ_b	σ_b	σ_c	σ_a	C_3^2	E	C_3^1
σ_c	σ_c	σ_a	σ_b	C_3^1	C_3^2	E

C_{3v} 集合中任意两个元素按上述定义的方法相乘，得到的元素仍在 C_{3v} 集合中，故该集合具有封闭性。

（2）可结合

因为每一个对称操作对应一个矩阵，因为该集合同构于一个矩阵集合，矩阵乘法具有可结合性，故该对称操作乘法也具有可结合性。至此该对称操作集合为一个半群。

（3）有单位元（幺元）

由上述对称操作运算表得，恒等元素 E 为 C_{3v} 半群的单位元，C_{3v} 为一个独异点。

（4）存在逆元

E 为单位元，C_3^1，C_3^1 互为对方的逆元，σ_a，σ_b，σ_c 的逆元即为其自身。

故 C_{3v} 为一个对称操作群。

一般地，将元素用三维坐标表示，对称操作用变换矩阵表示，对称操作群即为特殊的矩阵运算群。因矩阵运算群不是阿贝尔群，故对称操作群也不具有交换律。

3.2 分子点群

一个有限分子的对称操作群称作点群

1. 只含一个对称元素的点群(循环群)

这类点群只含一个对称元素，例如只含 1 个 C_n 轴，或镜面 σ，或映轴 S_n。它们可由一个群元素自身不断重复地进行操作而获得全部群元素，这类点群称为循环群。

含 1 个 C_n 轴对称元素的点群，可由 C_n^1 操作作为生成元素，重复地操作得到: C_n^1，C_n^2，⋯，C_n^n≡E，它们构成 C_n 点群。

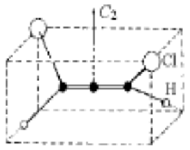
含 1 个镜面 σ 的点群可由 σ 作生成元素，重复操作得: σ，σ^2≡E，它们构成 C_s 点群。

含 1 个映轴 S_n 的点群，可用 S_n^1 作为生成元素重复操作而得。S_n^1 是个复合操作，情况要复杂一些。S_n^1 包含的两个复合操作是可交换的: $S_n^1=\sigma_h \cdot C_n^1=C_n^1 \cdot \sigma_h$ 由 S_n^1 的自乘幂所产生的群元素随 n 的奇、偶而不同，可分三种情况: [3]

(a)含 1 个 n 为偶数而又不为 4 的倍数的 S_n 轴。当 n=2，6，10，⋯等情况时，由于 $S_2^1=S_3^6=S_5^{10}=\cdots=i$ 即这个群中有对称中心，而且这个群中存在着由 C_n^2 对称元素构成的子群，所以将形成 C_n^{2i} 点群。当 n=2，形成 C_i 点群

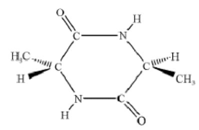
(b)含 1 个 n 为 4 的倍数的 S_n 轴当含有 n=4，8，12，⋯等为 4 的倍数的映轴 S_n 时，由于 $S_4^2=S_8^4=S_{12}^6=C_2^1$，它不存在 σ 和 i 对称元素，它是一类独立的点群，群的记号为 S_n。

(c)含 1 个 n 为奇数的 S_n 轴由于 $S_n^n=\sigma_h \neq E$，而 $S_n^{2n}=E$，所以群的阶为 2n。这种 S_n 轴等同于 C_n 轴和 σ_h 组合的效果相同，所得的点群记号为 C_{nh}

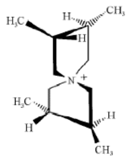


C_2

C_s



C_i



S_4

2 以 C_n 轴为基础加入 C_2 轴或镜面 σ 形成的群(非循环群)

以 C_n 轴为基础加入镜面 σ 或 C_2 轴或同时加 C_2 和 σ，这时所得的群元素不能由 1 个生成元素自身重复操作获得，所以称为非循环群。下面分别加以叙述。

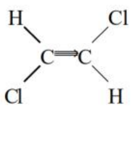
(a)C_{nh} 和 C_{nh} 点群所含的对称元素中，有一个 C_n 轴，一个镜面 σ_h 垂直于此轴。

(b)C_{nv} 和 C_{nv} 点群所含的对称元素中，有一个 C_n 轴，添加一个通过 C_n 轴的对称面 σ_v 后，由于 C_n 轴的存在，必然会产生 n 个 σ_v。

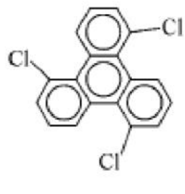
(c)D_n 点群，在 C_n 轴上添加一个 C_2 轴垂直于 C_n 轴，在通过该 C_2 轴垂直于 C_n 轴的平面内，必有 n 个 C_2 轴。

(d)D_{nh} 点群，在 D_n 点群的对称元素系中，添加 1 个对称面 σ_h 垂直于 C_n 轴，得到 D_{nh} 点群。组合 n 个 C_2 轴和 σ_h，必然有 n 个 σ_v。

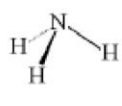
(e)D_{nd} 点群，在 D_n 点群的所有对称元素系中，添加 1 个对称面 σ_d，使其通过 C_n 轴而又平分二个 C_2 轴夹角，即得到 D_{nd} 点群。[4]



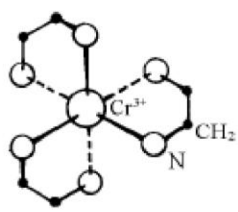
(a) C_{2h}



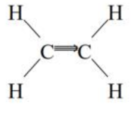
(b) C_{3h}



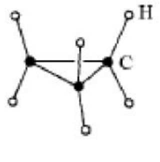
(c) C_{3v}



(d) D_3

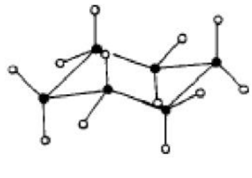


(e) D_{2h}



(f) D_{3h}

(g) D_{2d}



(h) D_{3d}

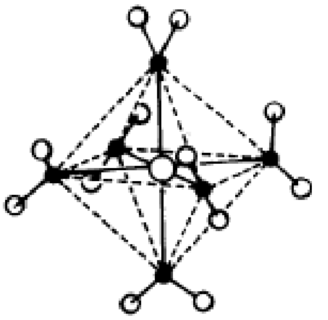
3 含有多个高次轴的点群

由包含多个高阶轴的对称单元组合而成的对称单元系对应于正多面体的对称性。正多面体意味着它的面是正多边形并且彼此相等，它的顶点角度和边也相等。正多面体有五种，T (Tetrahedralgroup) 四面体群;O (Octahedralgroup) 八面体群，它包括正八面体和立方体;I (Icosahedralgroup) 二十面体群，它包括五角十二面体和正三角二十面体。

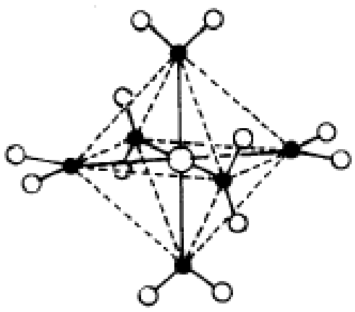
属于 T 点群的分子较少。$[Co(NO_2)_6]^{3-}$的一种构型具有这种对称性，在其中处于八面体对位的两个 NO_2基团平面互相垂直。如果改变 NO_2基团的取向使其互相平行，就出现 3 个互相垂直的镜面，它们也分别和 C_2轴垂直。这种构型的 $Co(NO_2)_3^{-6}$具有 T_h点群的对称性。正四面体形的分子和离子如 CH_4，P_4，SO_4^{2-}等均属 T_d点群。

O 和 O_h点群都具有垂直排列的 3 个 C_4轴，它们和立方体的边平行。在立方体对角线上有 4 个 C_3轴，通过两个相对的棱边的中点还有 C_2轴，这种对称元素系对应的点群为 O。在 O 点群中加入 σ_h使和 C_4轴垂直，可衍生出 O_h点群。

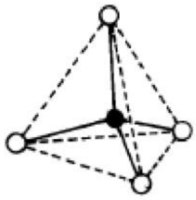
I 点群具有 6 个 C_5轴、10 个 C_3轴和 15 个 C_2轴，它们分别通过五角十二面体的相对的面、顶点和边的中心。若选择 3 个互相垂直的 C_2轴作主轴，垂直 C_2轴加 σ_h，得 15σ 和 i，这种对称元素系对应的点群为 I_h。$B_{12}H_{12}^{2-}$和 B_{12}等分子具有 I_h对称性。



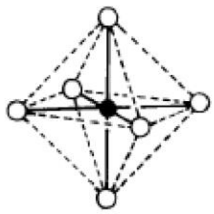
T



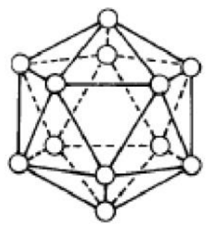
T_h



T_d



T_h



I_h

4 群论在分子研究上的应用

分子对称性是描述分子对称的表达，并根据分子对称性对分子进行分类。分子对称性是化学中的一个基本概念，因为它可以预测或解释许多分子的化学性质，如分子振动、分子偶极矩及其光谱数据。对称分子的许多性质都受其对称性的影响。例如，偶极矩的存在或不存在以及光谱的选择规则可以从它们的对称性来预测。量子力学计算通常使用分子对称性来简化计算。[5]这些性质主要由分子对称性决定，而对分子对称性的研究是基于群论的应用。

4.1 群论在分子旋光性判断上的应用

根据分子的对称性，我们可以直接判断分子是否具有旋光性。判断一个分子是否具有旋光性的常用方法是将原始物体与其镜像进行比较，看它们是否完全一致。所有与镜像不一致的分子都具有旋光性；相反，如果两者重合，分子就没有旋光性。可以看出，分子的旋转与分子的对称性有关。分子是否具有旋光性的标准是旋转轴的非旋光性；没有像旋转轴那样的

旋转。如果一个分子有一个对称平面、对称中心或镜像旋转轴，它的两半可以相互重合，并且必须与镜像重合。那么这个分子就没有旋光性了，由此可推出属于 C_1、C_n、D_n点群分子有旋光性，属于 S_n、C_n、T_d、O_h点群的分子无旋光性。

4.2 群论在分子偶极距判断上的应用

偶极距(μ)也是分子的静态性质。它的特点是分子的对称操作不会改变其大小和方向，因为分子的对称性反映了分子中原子核和电子云的对称性，分子正负电荷的重心必须在分子的对称元素上。如果一个分子有一个对称中心，且两个对称元素仅在一个点相交，则分子的正负重心落在同一点上，因此没有偶极距（ μ=0）。如果上述对称元素不存在，当分子的正负重心不落在同一点上时，就会产生偶极矩。根据“分子的对称元素是否只在一点相交”，可以预测分子的偶极距，可推测属于下列分子点群有偶极距 C_i、C_s、C_n、C_{nv}，而属于以 C_i、C_{nh}、 D_n、D_{nh}、D_{nd}、T_d、O_h 群的分子无偶极矩。[6]

5 结语

群论应用在了自然科学的各个方面。群论已经成为了自然科学中基础理论研究的主要工具。人们所生存的环境从宏观到微观,都具有了对称性。利用群论的相关原理来解决人们所面临的问题,就能够让人们对自然界现象和人类运动发展规律有进一步的认识。群论是人类认识和探究自然界现象的一种重要思维方法和有力工具。群论中充满着对大自然的和谐朴素与简约之美。没有群论这种数学工具，分子对称性的研究就不会达到今天这个高度。

参考文献:

[1] 张绍康.群论思想的产生、发展和意义(Zhang Shao-kang.The emergence, development and significance of group theory.)[J].昭通师范高等专科学校学报,2000(03):31-36.

[2] Molecular Symmetry 分子对称性 http://en.wikipedia.org/wiki/Molecular_symmetry

[3] 高等无机结构化学 /麦松威, 周公度, 李伟基著. (Advanced inorganic structural chemistry / Mai Songwei, Zhou Gongdu, Li Weiji.)北京: 北京大学出版社, 2001. 7 ISBN 7-301-04793-2.

[4] 结构化学基础/周公度，段连运编著.(Fundamentals of structural chemistry / Zhou Gongdu, edited by Duan Lianyun)一 4 版—北京： 北京大学出版社， 2008.01

[5] 康桃英.浅议群论在化学中的两种应用(Kang Taoying Two applications of group theory in Chemistry)[J].化学世界,2004(09):502-504.DOI:10.19500/j.cnki.0367-6358.2004.09.018.

[6] 李奴义.浅议群论在化学中的应用(Li nuyi On the application of group theory in Chemistry)[J].青海师范大学民族师范学院学报,2012,23(01):95-96.DOI:10.13780/j.cnki.63-1060/g4.2012.01.025.8