

对高中数学选修3-4“对称与群”的教学思考

——基于分子对称群理论

顾宇晴, 张霞*

(华南师范大学数学科学学院, 广州 510631)

摘要: 基于结构化学中的分子对称群理论, 给出高中数学选修课程专题“对称与群”的一种教学设想, 旨在拓展高中生的数学视野, 提高高中生对数学的应用价值的认识。

关键词: 高中数学选修课程; 群; 对称; 分子对称群

群论是高等数学专业课——《抽象代数》中的重要组成部分, “对称与群”在2003年作为选修系列A的专题首次选入高中数学教材^[1]. 而在高中开设此专题课程并不是为了直接向高中生讲授高等数学的内容, 其初衷是让学生体会群论在研究事物的对称性以及研究轴对称图形、中心对称图形等数学对象, 甚至是化学中的分子结构、物理中的原子结构等对象中的重要作用, 从而拓展高中生的数学视野, 提高高中生对数学应用价值的认识。

群论的内容较为抽象且与高中其他部分知识的联系相对不紧密, 这就给学生的理解带来一定的难度. 同时, 现行的教材对于群论的实际应用介绍得较为简略, 本文结合结构化学中的分子对称群理论给出一种教学设想, 以期有助于“对称与群”的一线教学。

1 对《对称与群》教材的基本解读

“对称与群”专题主要面向有志于学习数理类(数学、物理、计算机、精密仪器等)的学生^[2]. 课标在本专题的课程目标设置上没有给出具体限定, 在一线教学中主要由学校根据学情及教学条件弹性地进行难度及广度的把控. 综合课标和各版《对称与群》教材(人教A版^[3]、人教B版^[4]、苏教版^[5]、湘教版^[6]、北师大版^[7])的编排结构, 笔者将“对称与群”专题的要求大致归纳为如下4点:

(1) 由丰富实例体会现实生活中存在大量的对

称现象。

(2) 通过分析几何图形的对称性和轴对称、旋转、平移3种刚体运动形成对称变换的概念; 结合图形操作的示例认知对称变换的运算封闭性、对称变换合成、变换的结合律、等距变换、可逆变换、恒等变换和置换等概念。

(3) 基于第二点的知识建立起变换群的概念, 初步认知抽象群的概念; 基于对称变换了解群的表示方法, 能尝试写出简单图形或正多边形的对称群; 了解对称多项式及多项式的对称变换群的概念。

(4) 了解群论在各学科中的实际应用: 装饰艺术中的带饰和面饰、化学分子的对称群、晶体对称理论和代数方程根式可解性理论等。

2 基于分子对称群理论给出的“对称与群”的教学设想

2.1 问题提出

笔者发现苏教版、湘教版的《对称与群》教材并没有提及群论到底有何应用, 北师大版教材仅对伽罗瓦理论做了简单的拓展. 而像群论这样较为抽象的高等数学知识最容易让学生产生的疑问是: 学了之后有用吗? 有什么作用? 怎么样才能应用? 笔者研究了人教A版《对称与群》第三讲第二小节及人教B版《对称与群》教材第四章第三小节中所介绍的化学学科中的分子对称群内容, 提出了一种教学设想: 先从实际问题出发, 用化学分子对称性相关实

例作为讲解变换相关概念时的支撑材料,再将群的理论抽象出来进行分析,让学生理解了群论的相关理论后再介绍化学学科中如何使用群论的方法解决实际问题.这种教学设计思想注重培养新课标学科核心素养中的数学抽象素养^[2],也体现了学科之间的交叉综合运用.

2.2 分子对称群相关前导知识

2.2.1 对称操作

物质的结构决定物质的性质,利用对称及相关原理探讨分子的结构和性质是人们认识分子的重要途径,也是人们了解分子结构和性质的重要方法.关于分子的若干种对称操作及相应对称操作群等理论可参见文献^[8].

化学中是这样定义分子的对称操作的:能不改变分子内任何两点间的距离而使分子复原的操作.这里的复原指的是对称分子经过某一操作后,分子中每一原子都被放在周围环境与原先相同的点上,操作前后原子所在环境依然相同,无法区别操作前后的分子.

对称操作包括旋转、反映、反演、旋转-反映(象转)、恒等操作,每种对称操作中都有有一些具有特殊意义的几何对象(点、线、面等).

(1)旋转操作.是指将分子绕某一直线旋转一定角度后能使分子复原的操作.若分子绕此直线旋转 $360^\circ/n$ (n 为整数)后能使分子复原,则称此直线为分子的一条 n 重旋转对称轴 C_n ,称这样的旋转操作为 C_n^1 , n 最大的对称轴称为分子的主轴.

由环乙烷分子(C_6H_{12})绕其几何中心的直线旋转一定角度的简单示意图(图1)可知:环乙烷分子有无数条 C_1 旋转轴,1条 C_6 旋转轴.

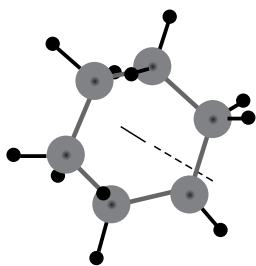


图1 环乙烷分子旋转操作示意图

(2)反映操作.是指使分子中的每一点都反映到该点到某镜面垂线的延长线上在镜面另一侧等距离处的操作,反映操作用 σ 表示,反映操作中的镜面用 σ 表示.由水分子(H_2O)经过反映操作前后的示意图(图2)可以看到:水分子经过反映操作后仍能得到复原.

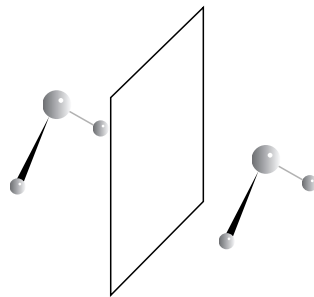


图2 水分子反映操作示意图

根据镜面和分子旋转轴的空间关系,又常以不同的下标区分特殊的镜面:通过主轴的镜面 σ_v 、与主轴垂直的镜面 σ_h 、通过主轴并平分2个副轴(垂直于主轴的轴,一般为 C_2)夹角的镜面 σ_d .

(3)反演操作.当分子有对称中心时,将分子中的每一个原子都移动到该原子与对称中心连线的延长线的等距离处,这样使分子复原的对称操作叫做反演操作,常用 i 表示.

(4)旋转-反映(象转)操作.将分子先绕某一轴旋转 $360^\circ/n$ (n 为整数),再沿垂直该轴的镜面进行反映,并且能够复原的分子操作叫做旋转-反映操作,用符号 S_n^1 表示,由旋转变换和反映变换的几何概念容易验证有 $S_n^1 = \sigma_h C_n^1 = C_n^1 \sigma_h$ 成立.

(5)恒等操作.是指分子中的任意原子位置保持不变的操作,用 E 表示.每个分子经过恒等操作都可以复原.

2.2.2 分子对称群的提出

一个分子具有的全部对称操作可由类似以下过程的讨论列出:

第一步:观察分子结构中是否存在正 n 边形或是类似正 n 边形的结构,以此确定是否可以进行旋转变换.如果可以进行旋转变换,则需要确定有多少种可能的旋转角度.

第二步:观察分子结构中是否存在轴对称的结构.若含有轴对称结构,则可以进行反映操作,一个平分分子并使分子内的原子成对地排在其两侧的平面可以对应一次反映操作;若含有轴对称结构,分子也可进行旋转操作 C_2^1 得到复原.

第三步:观察分子结构中是否存在中心对称的结构,若含有中心对称结构,则可以进行反演操作,一个对称中心对应一次反演操作.

第四步:基于第一步已经找出有多少种旋转角度可以选择,分别考虑在旋转这些角度后的分子沿垂直相应对称轴的平面进行反映后是否可以复原.

结束以上4个步骤后,再加上每个分子都具备的恒等操作,即得到一个分子所有可能的对称变换.

以水分子为例,我们发现水分子结构中存在轴对称结构(图3),且有2个平分分子并使分子内的原子成对地排在其两侧的平面,故水分子可进行2种反映操作和旋转操作 C_2^1 ;而水分子不存在中心对称结构,故无法进行反演操作;在进行了旋转操作 C_2^1 (旋转 180°)后,沿垂直对称轴的平面进行反映后无法复原水分子. 综上,水分子共有4种对称操作:旋转操作 C_2^1 ,2种不同的反映操作及恒等操作 E .

水分子的以上4种对称操作可形成一个对称操作群. 我们可以验证以上4种对称操作组成的集可以同时满足成为群的4个条件:运算封闭、存在单位元、存在逆元、运算满足结合律. 通过操作的合成也可以写出水分子对称操作群 C_{2v} 的乘法表(表1),其中 $\sigma_v(xz)$ 及 $\sigma_v(yz)$ 分别表示水分子在 $Oxyz$ 分子坐标系(图3)中关于 xOz 面及 yOz 面做的反映变换.

表1 水分子对称操作群 C_{2v} 的乘法表

	E	C_2^1	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
E	E	C_2^1	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$
C_2^1	C_2^1	E	$\sigma_v(yz)$	$\sigma_v(xz)$
$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(xz)$	$\sigma_v(yz)$	E	C_2^1
$\sigma_v(yz)$	$\sigma_v(yz)$	$\sigma_v(xz)$	C_2^1	E

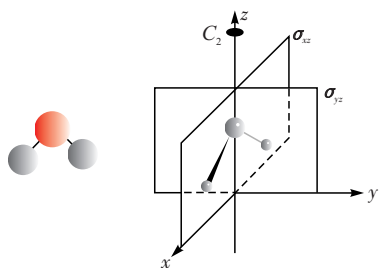


图3 水分子的立体构型及在三维直角坐标系 $Oxyz$ 中的示意图

遵循同样的步骤,可以写出氨分子(NH_3)的对称操作群 C_{3v} 的乘法表(表2),其中 σ_a 、 σ_b 和 σ_c 分别表示了氨分子在 $Oxyz$ 分子坐标系(图4)中关于垂直 xOy 面的面 a 、面 b 和面 c 所做的反映变换.

表2 氨分子对称操作群 C_{3v} 的乘法表

	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

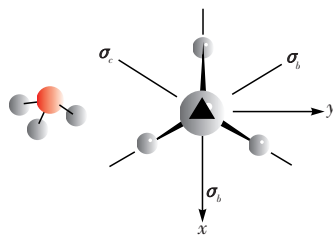


图4 氨分子的立体构型及在三维直角坐标系 $Oxyz$ 中的示意图

2.2.3 量子化学中的群论应用 在《对称与群》教材中所提及的群的理论知识只是最基本的群的理论. 如果若干个不同分子的对称操作群同构,则这些分子在结构和性质上具有很大的相似性,可以将他们归为一类,这样归纳种类研究性质的方法可以辅助简化某些定性的研究过程. 群论可以用于弄清由于研究对象中存在的对称性必然使体系具有什么性质,沟通对称性这一现象与物质性质这一本质的桥梁就是群论^[9]. 而《对称与群》教材中未介绍的更复杂深入的群和群的理论可以简化部分量子化学的研究步骤,例如分子对称群的不可约表示可以应用于确定电子跃迁的类型、探究分子轨道的一些规律、完善配位场理论等^[10]. 群和群的理论也可以减轻包括量子化学计算在内的部分研究工作量.

2.3 具体教学设想

综合5个版本的《对称与群》教材^[3-7],笔者给出如下一种大致教学框架.

在本专题的教学中,可以由生活中大量实例引出对称的概念,再对平面刚体运动(反射、旋转、平移等)及平面刚体运动的概念和性质进行介绍. 教师可以先介绍简单的反射、旋转、平移,引出对称变换的概念. 而由于高中生已经掌握了反射、旋转、平移等二维平面中以上刚体运动的概念^[11],教师不必在二维图形的对称变换上停留过久,可以再上升一个维度介绍三维图形的对称变换. 此时可以先从简单的几何体(如长方体、圆柱、三棱锥等)入手,再上升难度,以化学分子(如水分子、氨分子、苯分子等)为素材讨论复杂一些的立体几何图形的能有多少种对称变换(即2.2.2中提及的水分子、氨分子的对称操作),锻炼学生迁移知识的技能,树立学生有序思考的意识,也培养学生直观想象这一核心素养.

在立体图形的对称变换和分子的对称操作的探讨讨论过程中,对称变换的合成、对称变换的性质及对称变换的逆变换都可以被自然地引出,从而得到对称群这一特殊的代数结构的概念. 对群相关的其他理论及对称多项式的概念等其他知识进行拓展.

这是因为化学分子结构的对称性与几何图形的对称性本质是相同的,化学分子就是一种三维空间上特殊的立体结构,这给我们提供了很好的教学素材.

我们可以给出群论中部分概念与分子对称群理论中部分概念的对比表格(表3)作为本专题教学实践的原材料.

表3 群论中部分概念与分子对称群理论中部分概念的对比

相关概念	在群论中	在分子对称群理论中
群的实例	正 n 边形等对称图形的变换及变换形成的群	由水分子、氨分子等对称分子的对称操作及对称操作形成的群
群中的元素	平面刚体运动:旋转变换、反射变换、中心对称变换、先旋转变换再反射变换、恒等变换	分子对称操作:旋转操作、反映操作、反演操作、旋转-反映操作、恒等操作
相关运算	对称变换的合成 对称变换的逆	对称操作的组合 对称操作的逆

最后,教师可以对其他学科中如何使用群论的理论解决实际问题进行介绍,可以基于 2.2.3 所提及的群论在量子化学中应用进行拓展,也可以介绍群论知识在几何晶体学、艺术设计、求解代数方程等方面的运用.限于高中生的知识水平能力,更深入的群论知识可以不必进行过多的介绍,可鼓励个别感兴趣的同学在课余进行课外材料的阅读和知识的拓展.

3 结语

对称概念看似简单,但却能够引申出群论这样一门精妙的理论.群就是对称概念的数学描述,研究群就是为了研究复杂的对称.虽然高中生的平均知识能力水平还不足以对群论有深刻的理解与认识,但是对群论进行简单的了解,可以拓展他们的数学视野,让高中学生对数学的应用价值有更切实的认识.

此外,文中提到的分子的对称操作均可用矩阵的形式进行刻画,并且利用矩阵及其理论也可以解决很多量子化学、晶体结构中的问题,在进行选修专题 4-2《矩阵与变换》的教学时,教师也可以考虑将分子对称性问题与矩阵理论进行交叉结合,拓展学生的数学视野,让学生对数学的应用价值有更深刻的认识.

参考文献:

- [1] 中华人民共和国教育部. 普通高中数学课程标准(实验)[M]. 北京:人民教育出版社,2003:73-75.
- [2] 中华人民共和国教育部. 普通高中数学课程标准[M]. 北京:人民教育出版社,2017:50-55.
- [3] 课程教材研究所. 普通高中课程标准实验教材数学 A 版选修 3-4 对称与群[M]. 北京:人民教育出版社,2007.
- [4] 课程教材研究所. 普通高中课程标准实验教材数学 B 版选修 3-4 对称与群[M]. 北京:人民教育出版社,2007.
- [5] 课程教材研究所. 普通高中课程标准实验教材数学选修 3-4 对称与群[M]. 南京:江苏凤凰教育出版社,2007.
- [6] 课程教材研究所. 普通高中课程标准实验教材数学选修 3-4 对称与群[M]. 长沙:湖南教育出版社,2005.
- [7] 课程教材研究所. 普通高中课程标准实验教材数学选修 3-4 对称与群[M]. 北京:北京师范大学出版社,2007.
- [8] 周公度,段连运. 结构化学基础[M]. 5 版. 北京:北京大学出版社,2017:122-129.
- [9] 誉文德,张德聪. 群论与分子对称性[M]. 广州:华南工学院出版社,1987.
- [10] 奇泽姆 C D H. 量子化学中的群论方法[M]. 北京:科学出版社,1981.
- [11] 中华人民共和国教育部. 义务教育数学课程标准[M]. 北京:北京师范大学出版社,2011.

【责任编辑:庄晓琼 责任校对:庄晓琼】