

---

# 《物理学中的群论》讲义

任课教师：刘奇航  
讲义编辑：李嘉裕，刘奇航



南方科技大学  
SOUTHERN UNIVERSITY OF SCIENCE AND TECHNOLOGY

2024 年 12 月 25 日

---

# 目录

<b>1 群的基本概念</b>	<b>1</b>
1.1 群的定义、性质及例子	1
1.2 子群与陪集	9
1.3 不变子群和类	13
1.4 同构与同态	20
1.5 直积与直积因子	22
1.6 变换群 (置换群)	25
<b>2 群的表示理论</b>	<b>30</b>
2.1 群表示	30
2.2 等价表示, 不可约表示, 酉表示	37
2.3 群代数与群函数	50
2.4 有限群表示理论	55
2.5 特征标理论	64
2.6 新表示的构成	69
<b>3 完全转动群</b>	<b>84</b>
3.1 连续群简介	84
3.2 三维转动群 $SO(3)$	96
3.3 二维幺模酉矩阵群 $SU(2)$	104
<b>4 点群与空间群</b>	<b>115</b>
4.1 点群基础	115
4.2 第一类点群	118
4.3 第二类点群	122
4.4 晶体点群和空间群	129
<b>5 群论与量子力学</b>	<b>146</b>
5.1 哈密顿算符群	146
5.2 微扰引起的能级分裂	153
5.3 投影算符	156
5.4 矩阵元定理与选择定则	165
5.5 晶体平移群	174
5.6 晶体空间群与能带	176
5.7 双群与旋量波函数	184
5.8 时间反演不变性	190

# 1 群的基本概念

## 1.1 群的定义、性质及例子

§ 定义 1.1. 群 设  $G$  是一些元素（操作）的集合，记为  $G = \{\dots, g, \dots\}$ ，在  $G$  中定义了代数（乘法）运算，如果  $G$  中元素对这种运算满足下面四个条件，则称  $G$  是一个群。

1. 封闭性：任意两个元素的乘积仍属于这类元素的集合，即  $\forall f, g \in G$ ，有  $fg \in G$ ；
2. 结合律：对于  $\forall f, g, h \in G$ ，有  $f(gh) = (fg)h$ ；
3. 单位元：存在单位元素  $e$ ，使得对  $\forall f \in G$ ，有  $ef = fe = f$ ；
4. 逆元素：对  $\forall f \in G$ ，存在  $f^{-1} \in G$ ，使  $f^{-1}f = ff^{-1} = e$ 。

需要注意，群乘法运算不一定满足交换律，即  $fg$  不一定等于  $gf$ 。在满足以上定义外，群  $G$  还满足以下性质。

注 1. 单位元  $e$  唯一。

证明. 假设  $e$  和  $e'$  都为  $G$  中单位元，则  $ee' = e'e = e = e'$ 。 □

注 2. 逆元  $f^{-1}$  唯一。

证明. 假设  $g$  和  $h$  为  $f \in G$  的两个逆元，则  $g = ge = gfh = eh = h$ 。 □

注 3. 逆元  $f^{-1}$  的逆为  $f$ 。

证明. 因为  $ff^{-1} = f^{-1}f = e$ ，所以  $(f^{-1})^{-1} = f$ 。 □

注 4.  $fg$  的逆为  $g^{-1}f^{-1}$ 。

证明. 因为  $fgg^{-1}f^{-1} = ff^{-1} = e$ ， $g^{-1}f^{-1}fg = g^{-1}g = e$ ，所以  $(fg)^{-1} = g^{-1}f^{-1}$ 。 □

以下为几个群的例子。

例 1.1. 整数集及其上的加法运算，记为  $\{\mathbb{Z}, +\}$ ，单位元  $e = 0$ ，逆元  $a^{-1} = -a$ 。

例 1.2. 实数集及其上的加法运算，记为  $\{\mathbb{R}, +\}$ ，单位元和逆元同上。

例 1.3. 非零实数集及其上的乘法运算，记为  $\{\mathbb{R}/0, \times\}$ ，单位元  $e = 1$ ，逆元  $a^{-1} = 1/a$ 。

例 1.4. 空间反演群  $\{E, I\}$ ，元素为对  $\mathbb{R}^3$  空间矢量  $\mathbf{r}$  的操作  $E\mathbf{r} = \mathbf{r}$ ， $I\mathbf{r} = -\mathbf{r}$ ，群乘法为相继操作。

证明. 从群的四个条件证明：

1. 单位元：显然  $EE = E$ ，且  $EI\mathbf{r} = IE\mathbf{r} = -\mathbf{r} = I\mathbf{r} \Leftrightarrow EI = IE = I$ ，则  $E$  为单位元。
2. 逆元素： $E^{-1} = E$ ， $I^{-1} = I$ 。
3. 封闭性： $EI = I$ ， $IE = I$ ， $EE = E$ ， $II = E$ 。
4. 结合律： $(EI)E = E(IE) = I$ 。

即  $\{E, I\}$  在相继操作下构成群, 为二阶反演群。  $\square$

以上证明的关键在于封闭性的证明, 为了直观表示元素间的乘法关系, 我们可以将乘法关系的结果写成以下表格:

	$E$	$I$
$E$	$E$	$I$
$I$	$I$	$E$

此表称为群乘法表。群乘法表常用于描述群元个数为有限个的群。

**例 1.5.**  $\mathbb{R}^3$  中绕一固定轴的所有转动操作, 两个转动操作的乘法运算为两操作的相继转动。

证明. 记转动轴为  $z$  轴, 而绕  $z$  轴逆时针转动  $\alpha$  角的操作为  $C_z(\alpha)$ 。类似地, 从四个条件证明:

1. 单位元: 绕  $z$  轴转动  $0$  角度的操作为单位元  $C_z(0)$ 。
2. 逆元素:  $C_z(\alpha)$  的逆元素为  $C_z(-\alpha)$ , 即绕  $z$  轴顺时针旋转  $\alpha$  角的操作。
3. 封闭性: 相继操作  $C_z(\alpha)C_z(\beta) = C_z(\alpha + \beta)$  为绕  $z$  轴逆时针旋转  $(\alpha + \beta)$  角的操作, 仍是绕  $z$  轴的旋转操作。
4. 结合律:  $[C_z(\alpha)C_z(\beta)]C_z(\gamma) = C_z(\alpha)[C_z(\beta)C_z(\gamma)] = C_z(\alpha + \beta + \gamma)$ 。

即  $\mathbb{R}^3$  中绕一固定轴的所有转动操作构成群, 因其能用行列式为  $1$  的  $2$  阶正交矩阵表示, 故称为  $SO(2)$  群。  $\square$

**例 1.6.**  $n$  阶置换群  $S_n$ , 其中的元素定义为将  $1, 2, \dots, n$  这  $n$  个数一对一对应到  $1, 2, \dots, n$  上的映射。每个元素可以表示为

$$p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix}, \quad (1.1)$$

表示映射  $p: 1 \rightarrow m_1, 2 \rightarrow m_2, \dots, n \rightarrow m_n$ 。群乘法为相继映射。如我们写出  $5$  阶置换群的一个元素为  $\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 2 & 3 & 1 & 5 & 4 \end{pmatrix}$ 。

证明. 从群的四个条件证明:

1. 单位元: 恒等映射  $e = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$  为单位元。
2. 逆元素: 元素  $p$  的逆元素为  $p^{-1} = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$ 。
3. 封闭性: 若  $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix}$ ,  $q = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ q'_1 & q'_2 & \cdots & q'_n \end{pmatrix}$ , 其中  $q'_1, \dots, q'_n$  是  $q_1, \dots, q_n$  的重排列, 则有

$$\begin{aligned} qp &= \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ q'_1 & q'_2 & \cdots & q'_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ q'_1 & q'_2 & \cdots & q'_n \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (1.2)$$

即  $qp$  同样是对  $n$  个数的一对一映射。

4. 结合律: 若  $p = \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix}$ ,  $q = \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix}$ ,  $r = \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix}$ , 则有

$$\begin{aligned}
 (rq)p &= \left[ \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix} \right] \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} q_1 & q_2 & \cdots & q_n \\ r_1 & r_2 & \cdots & r_n \end{pmatrix} \cdot \left[ \begin{pmatrix} m_1 & m_2 & \cdots & m_n \\ q_1 & q_2 & \cdots & q_n \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ m_1 & m_2 & \cdots & m_n \end{pmatrix} \right] \\
 &= r(qp)
 \end{aligned} \tag{1.3}$$

满足结合律。

□

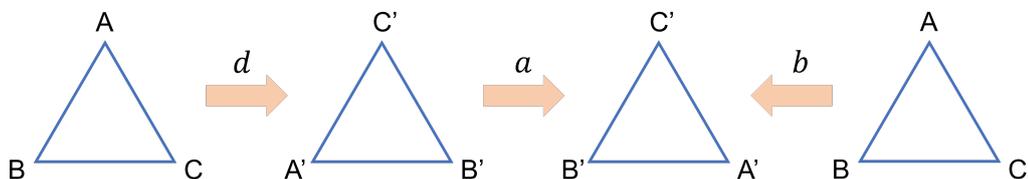
**例 1.7.** 平面正三角形对称群  $D_3$ , 即由保持正三角形不变的纯转动操作构成的集合, 群乘法为相继操作。

证明. 如图1.1所示, 一共有六个保持正三角形不变的转动操作, 分别为:

1.  $e$ : 不变操作;
2.  $d$ : 绕  $z$  轴逆时针旋转  $2\pi/3$ ,  $C_z(2\pi/3)$ ;
3.  $f$ : 绕  $z$  轴逆时针旋转  $4\pi/3$ ,  $C_z(4\pi/3)$ ;
4.  $a$ : 绕 1 轴旋转  $\pi$ ,  $C_1(\pi)$ ;
5.  $b$ : 绕 2 轴旋转  $\pi$ ,  $C_2(\pi)$ ;
6.  $c$ : 绕 3 轴旋转  $\pi$ ,  $C_3(\pi)$ ;

易证单位元为  $e$ , 各元素都存在逆元,  $e, a, b, c$  以自身为逆元, 而  $d$  和  $f$  互为逆元。因此, 只需证明封闭性和结合律。

1. 封闭性: 通过任意相继进行两个操作, 可以得到封闭性。以  $ad$  为例, 先进行  $d$  操作, 再进行  $a$  操作, 得到的结果和单独进行  $b$  操作相同, 因此有  $ad = b$



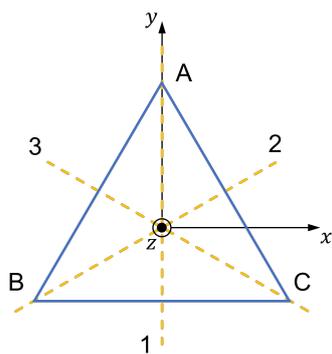
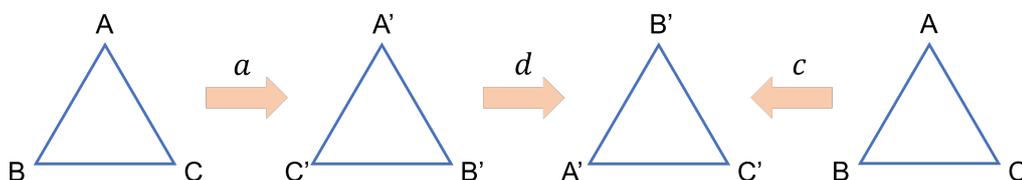


图 1.1:  $D_3$  群示意图。

$D_3$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$e$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$d$	$d$	$f$	$e$	$c$	$a$	$b$
$f$	$f$	$e$	$d$	$b$	$c$	$a$
$a$	$a$	$b$	$c$	$e$	$d$	$f$
$b$	$b$	$c$	$a$	$f$	$e$	$d$
$c$	$c$	$a$	$b$	$d$	$f$	$e$

表 1.1:  $D_3$  群乘法表。

类似地，先进行  $a$  操作，再进行  $d$  操作，得到的结果和单独进行  $c$  操作相同，因此有  $da = c$ 。



同理，通过计算两两操作间的相继操作，我们可以得到乘法表如表1.1所示，满足封闭性。值得注意的是，观察  $D_3$  群的乘法表1.1，可以发现乘法表关于主对角线并不是对称的，即对于  $g, f \in D_3$ ,  $gf$  和  $fg$  不一定相等。

2. 结合律：籍由乘法表表1.1，我们容易验证其满足结合律。

□

除了在平面正三角形中直接进行操作而得出群乘法关系，我们还能通过 3 阶置换群  $S_3$  表示同样的结构。我们可以定义如下对应关系

$$\begin{aligned}
 e &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ A & B & C \end{pmatrix}, & d &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix}, & f &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ C & A & B \end{pmatrix}, \\
 a &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ A & C & B \end{pmatrix}, & b &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ C & B & A \end{pmatrix}, & c &\Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & A & C \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{1.4}$$

其中置换  $\begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix}$  表示将顶点  $A$  移动到原来顶点  $B$  的位置，以此类推。根据置换操作的乘法关系，我们容易发现由以上置换操作构成的  $S_3$  群和  $D_3$  群拥有相同的乘法表，即具有相同的结构。比如我们可以验证

$$ad \Leftrightarrow \begin{pmatrix} A & B & C \\ A & C & B \end{pmatrix} \cdot \begin{pmatrix} A & B & C \\ B & C & A \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} A & B & C \\ C & B & A \end{pmatrix} \Leftrightarrow b. \tag{1.5}$$

可见，即便群元和群乘法不相同，不同的群可以描述相同的结构。描述同一结构的不同群可以认为是同一结构的不同表示方法。因此，对于群元为抽象操作的抽象群，我们可以用结构相同但群元不同，但更为简单的、便于计算的群来描述抽象群，由此便引申出群的表示理论，即使用矩阵群作为抽象群的表示方法。以下为几个矩阵群的例子，下文默认以矩阵乘法为群乘法。

**例 1.8.** 满足特定条件的所有  $n \times n$  复方阵  $A$  组成的集合：

1.  $\det(A) = 0$ ，不构成群，因不存在逆元。
2.  $\det(A) \neq 0$ ，构成群，因行列式非零方阵可逆，容易验证其他三个条件也满足。
3.  $\det(A) = 1$ ，构成群。
4.  $\det(A) = -1$ ，不构成群，因不满足封闭性： $\det(AB) = \det A \det B = 1 \neq -1$ 。
5.  $|\det(A)| = 1$ ，构成群。如果矩阵  $A$  是酉的 (Unitary)，即满足  $A^\dagger A = I$  ( $\dagger$  表示矩阵的转置共轭)，则称该群为  $U(n)$  群，即  $n$  阶酉群。如果在此基础上进一步要求  $\det A = 1$ ，仍然构成群，称该群为特殊  $n$  阶酉群，即  $SU(n)$  群。

**例 1.9.** 以下六个 3 阶矩阵构成群：

$$\begin{aligned} E &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad F = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ A &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad B = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad C = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

这六个矩阵所组成群的乘法表在映射  $e \Leftrightarrow E, \dots, c \Leftrightarrow C$  后与  $D_3$  群的乘法表表 1.1 一致。这是因为若我们定义三个列矢量  $\mathbf{v}_A = (1, 0, 0)^T$ ,  $\mathbf{v}_B = (0, 1, 0)^T$ ,  $\mathbf{v}_C = (0, 0, 1)^T$  分别对应图 1.1 正三角形的三个顶点  $A$ 、 $B$ 、 $C$ 。当将上述矩阵作用在列矢量上时，相当于三个矢量间的置换，即对应于正三角形三个顶点的置换。因此我们可以认为以上六个 3 阶矩阵所构成的群形成对  $D_3$  群的一个表示方法，因为使用的是 3 阶矩阵，我们也称之为 3 维表示。同样地，我们也能找到六个 2 阶矩阵满足相同的乘法关系。

**例 1.10.** 以下六个 2 阶矩阵构成群：

$$\begin{aligned} E' &= \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad D' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad F' = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \\ A' &= \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad B' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad C' = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (1.7)$$

不难验证以上六个 2 阶矩阵满足相同与  $D_3$  相同的乘法表。为了联系起  $D_3$  群和以上矩阵群，我们可使用平面直角坐标系描述正三角形图 1.1 的三个顶点，如图 1.2 所示。

以  $d$  操作即绕  $z$  轴逆时针旋转  $2\pi/3$  为例，设对应于  $d$  操作的 2 阶矩阵为  $\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix}$ ，该操作将  $A(0, 2)$  点转动到  $B(-\sqrt{3}, -1)$  点，将  $C(\sqrt{3}, -1)$  点转动到将  $A(0, 2)$  点，即满足以下两个矩阵方程：

$$\begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -\sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix}, \quad \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \sqrt{3} \\ -1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 2 \end{pmatrix}. \quad (1.8)$$

由此我们解得  $a_{11} = -1/2, a_{12} = -\sqrt{3}/2, a_{21} = \sqrt{3}/2, a_{22} = -1/2$ 。其他矩阵同理可得。

当进一步尝试使用 1 阶矩阵 (数) 来构造相同的结构时，我们会发现这样的构造是不存在的，因为 1 阶矩阵过于简单，无法承载原来群的一些信息，比如  $D_3$  中元素间乘法是不可交换的，但在 1 阶矩阵中，矩阵乘法退化为数乘，无法满足不可交换的性质。更详细的内容将在第二章群表示理论中学习。

在初步熟悉群的基本定义后，我们将引入更多群论中的基本概念。

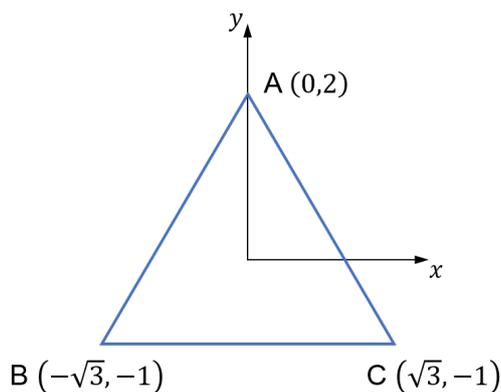


图 1.2: 以直角坐标系描述正三角形。

**§ 定义 1.2. 有限群与无限群** 群  $G$  内元素个数称为群的阶, 记做  $|G|$ 。当群阶有限时, 称为有限群, 当群阶无限时, 称为无限群。

**例 1.11.** 整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$ 、实数加群  $\{\mathbb{R}, +\}$  为无限群。

**例 1.12.**  $D_3$  是有限群, 群阶  $|D_3| = 6$ ;  $n$  阶置换群  $S_n$  为有限群, 群阶  $|S_n| = n!$ 。

**§ 定义 1.3. Abel 群 (交换群)** 当元素的乘法运算满足交换律, 即  $ab = ba$  时, 这个群被称为 *Abel 群*, 亦称交换群。

**§ 定义 1.4. 生成元** 由群  $G$  的一个最小的群元的集合及其运算关系就可以构造出一个群, 这个最小的群元的集合称为群  $G$  的生成元集, 其中的元称为生成元。

**例 1.13.** 整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$  的生成元集可以取为  $\{1\}$ , 也可以取为  $\{-1\}$ 。

**例 1.14.** 空间反演群  $\{E, I\}$  的生成元集为  $\{I\}$ 。

**例 1.15.**  $D_3$  群的生成元集可以取为  $\{d, a\}$ , 或者  $\{f, b\}$  等, 虽然这两个集合所含元素不同, 但元素个数相同, 这个数目称为有限群的秩。

**§ 定义 1.5. 循环群** 在群  $G$  中, 若存在一个元素  $g \in G$ , 使得对任意  $a \in G$ , 都能表示为  $a = g^i$  ( $i \in \mathbb{Z}$ ) 的形式, 则称  $G$  为循环群。元素  $g$  为该群的生成元。

**例 1.16.** 对于整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$ , 取其生成元  $1$ , 所有群元都能表示为  $n = 1^n$ ; 或者可取  $-1$  为生成元, 则所有群元都可表示为  $n = (-1)^{-n}$ , 因此群  $\{\mathbb{Z}, +\}$  是循环群。

**§ 定义 1.6.  $n$  阶循环群** 由一个元素  $a$  及其幂次构成的有限群  $C_n = \{a, a^2, \dots, a^{n-1}, a^n = e\}$  称为  $n$  阶循环群,  $a$  为循环群的生成元,  $n$  亦为群元  $a$  的阶, 同样也是群的阶  $|C_n| = n$ 。

证明. 由于封闭性,  $a$  的任意幂次都是  $C_n$  中的群元, 只需证明当  $n$  是满足  $a^n = e$  的最小值时,  $a, a^2, \dots, a^{n-1}, a^n$  为各不相同的群元即可。采用反证法, 若存在正整数  $i, j$  使得  $1 \leq i < j \leq n$  且  $a^i = a^j$ , 等式两边左乘  $a^{-i}$  后, 有  $a^{j-i} = e$ , 矛盾。因此  $C_n$  由  $a$  的幂次生成。□

**例 1.17.** 空间反演群  $\{E, I\}$  为 2 阶循环群。

**例 1.18.** 分圆方程  $x^n = 1$  的根  $\{1, \omega, \omega^2, \dots, \omega^{n-1}\}$  在数乘下构成  $n$  阶循环群  $C_n$ , 其中  $\omega = e^{i2\pi/n}$ 。

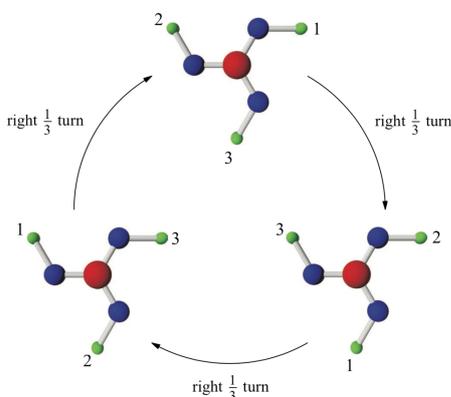


图 1.3: 具有 3 重旋转不变性的分子结构。

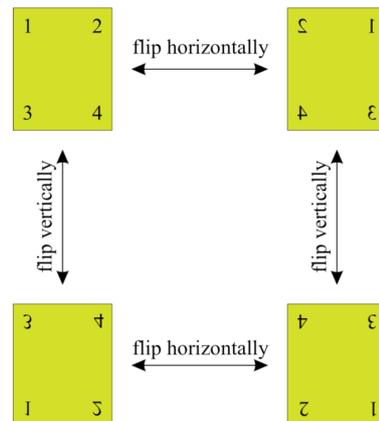


图 1.4:  $V_4$  群示意图。

$n$  阶循环群  $C_n$  可以描述只具有  $n$  重旋转不变性物体的对称性, 如图1.3所示, 保持具有 3 重旋转不变性的分子结构不变的操作组成 3 阶循环群  $C_3$ 。之后将证明, 阶为 3 的群只有  $C_3$ , 但对于更大的阶数  $n > 4$ , 可能存在除  $C_n$  外的其他群。例如, 对于 4 阶群, 除了  $C_4$  群, 还有 Klein 四元群。

**例 1.19.** 保持平面长方形不变的纯转动操作构成的群, 称为 Klein 四元群  $V_4$ , 或  $D_2$  群。

如图1.4所示, Klein 四元群的群元包括不动操作  $e$ , 绕水平 ( $x$ ) 轴转动  $\pi$  角度  $a = C_x(\pi)$ , 绕竖直 ( $y$ ) 轴转动  $\pi$  角度  $b = C_y(\pi)$ , 以及两个转动操作的相继操作, 即为绕垂直于  $x$  及  $y$  轴的  $z$  轴转动  $\pi$  角度  $ab = ba = C_z(\pi)$ , 因此  $V_4 = \{e, a, b, ab = ba\}$ 。易知  $V_4$  群为 Abel 群。为了验证  $V_4$  群不是一个循环群, 其中一种方法是写出  $V_4$  的群乘法表, 依次判断不同的群元是否能写为同一群元的幂次形式, 这种方法比较繁琐。因此我们将介绍另一种描述有限群结构的常用方法: Cayley 图。

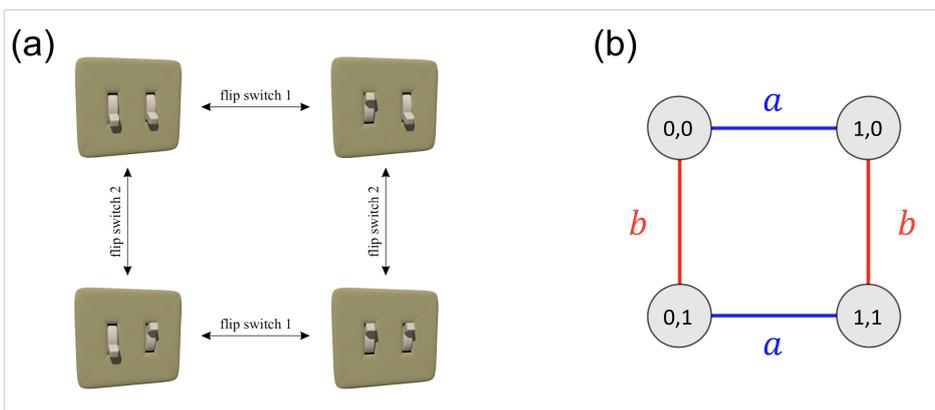


图 1.5: (a) 与 Klein 四元群  $V_4$  具有相同结构的开关态。(b)  $V_4$  群的 Cayley 图。

首先, 我们用两个独立的开关组成的态描述操作过后的平面长方形。如图1.5(a)所示, 我们用 0 和 1 分别描述开关的关闭和打开,  $e$  操作对应于状态  $(0,0)$ ,  $a$  操作对应于改变第一个开关,  $b$  操作为改变第二个开关。两个开关一共有四个状态, 即  $(0,0), (1,0), (0,1)$  和  $(1,1)$ , 四个状态间可以通过  $a$  和  $b$  进行连接。接着, 若用蓝线代表  $a$  操作, 红线代表  $b$  操作, 则四个状态的相连情况就如图1.5(b)所示。我们发现, 从任意一个状态出发, 都不可能只用单一颜色的线连起其他状态, 即不可能只用一个生成元的幂次表示所有群元。因此  $V_4$  不是一个循环群。由此, 我们知道群阶为 4 的群至少有 4 阶循环群和 Klein 四元群这两种。

通过之前诸多例子，我们意识到以不同的元素为群元，可以得到各种各样的群，但是其中有一些群，虽然包含的群元不同，但我们可以通过构建群元素之间的对应关系，建立起两个群之间的关系，且被联系起的两个群具有相同的乘法表或 Cayley 图，如  $D_3$  群和  $S_3$  群之间就可以建立起这种对应。因此，在群结构的层面，这些能被群元间的对应关系联系起的群应被视为等价的，这便引申出以下的重要定义。

**§ 定义 1.7. 同构** 若从群  $G$  到群  $F$  上，存在一一对应的满映射  $\Phi$ ，且这个映射本身保持群的乘法运算规律不变，则称群  $G$  与群  $F$  同构，记作  $G \cong F$ 。映射  $\Phi$  称为同构映射。

**注.** 群同构关系可以用图 1.6 表示，其中映射保持群乘法运算不变，意味着  $G$  中两个元素乘积的映射，等于  $F$  中两个元素映射后像的乘积，即对于所有  $g_i, g_j \in G$ ，都满足  $\Phi(g_i g_j) = \Phi(g_i) \Phi(g_j)$ 。

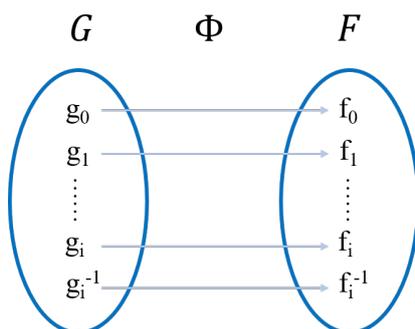


图 1.6: 群同构关系图。

**例 1.20.** 平面正三角形对称群和 3 阶置换群同构  $D_3 \cong S_3$ ，同构映射已由式 1.4 给出。

**例 1.21.** 整数模  $n$  加法群同构于  $n$  阶循环群  $Z_n \cong C_n$ 。整数模  $n$  加法群表示为  $Z_n = \{0, 1, 2, \dots, n-1\}$ ，其中  $n$  为正整数  $n \in \mathbb{Z}^+$ ，群乘法定义为加法对  $n$  取模，即

$$a \cdot b = (a + b) \bmod n. \quad (1.9)$$

证明. 记  $n$  阶循环群为  $C_n = \{a^n = e, a^1, a^2, \dots, a^{n-1}\}$ ，对于任意  $g \in Z_n$ ，我们可以构造以下一一映射  $\Phi$

$$\Phi : g \rightarrow \begin{cases} a^g & \text{if } g \neq 0, \\ e & \text{if } g = 0. \end{cases} \quad (1.10)$$

只需证明该映射保持乘法运算规律不变即可。现在考虑  $\Phi(g_1 \cdot g_2)$ ：

1. 若  $g_1$  和  $g_2$  其中一个为 0，不妨设  $g_1 = 0$ ，显然有  $\Phi(0 \cdot g_2) = \Phi(g_2) = e \cdot \Phi(g_2) = \Phi(0) \cdot \Phi(g_2)$ 。
2. 若  $g_1$  和  $g_2$  都不为 0，如果  $g_1 + g_2 < n$ ，则  $\Phi(g_1 \cdot g_2) = a^{g_1+g_2} = a^{g_1} \cdot a^{g_2} = \Phi(g_1) \cdot \Phi(g_2)$ ；如果  $g_1 + g_2 \geq n$ ，则  $\Phi(g_1 \cdot g_2) = a^{g_1+g_2-n} = a^{g_1} \cdot a^{g_2} = \Phi(g_1) \cdot \Phi(g_2)$ 。

因此映射  $\Phi$  保持乘法规则不变，即  $Z_n \cong C_n$ 。 □

**例 1.22.** 所有模长为 1 的复数在乘法下形成的群，即  $U(1)$  群，与行列式为 1 的 2 阶正交矩阵群  $SO(2)$  同构，即  $U(1) \cong SO(2)$ 。

证明. 模长为 1 的复数可表示为  $e^{i\alpha}$ ，而行列式为 1 的二阶正交矩阵可表示为  $\begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha \\ \sin \alpha & \cos \alpha \end{pmatrix}$ ，二者存在一一对应关系，以此构建同构映射，易证其保持乘法规则不变。 □

由于同构关系的存在, 我们此后以精确到同构层面为准判断两个群是否“相等”。有了同构的概念后, 我们将给出群论中最基本的定理。

■ **定理 1.1. 重排定理** 设  $G = \{\dots, g_\alpha, \dots\}$ , 对  $\forall u \in G$ , 当  $g_\alpha$  取遍  $G$  中所有元素时,  $ug_\alpha$  给出且仅仅一次给出  $G$  中所有元素。上述定理对右乘亦成立。

证明. 记  $uG = \{ug_\alpha | g_\alpha \in G\}$ 。以下证明取定任一  $u \in G$  后, 对  $\forall g_\alpha \in G$ , 映射  $\Phi: ug_\alpha \rightarrow g_\beta$  为一一映射。

1.  $\Phi$  为满射: 对  $\forall g_\beta \in G$ , 都存在  $u^{-1}g_\beta \in G$ , 当  $g_\alpha$  取到  $u^{-1}g_\beta$  时, 有  $ug_\alpha = u(u^{-1}g_\beta) = g_\beta$ , 即  $\Phi$  为满射。
2.  $\Phi$  为单射: 采用反证法, 假设  $g_i, g_j \in G$ , 且  $g_i \neq g_j$ , 但  $ug_i = ug_j$  (多对一), 左乘  $u^{-1}$  则导致  $g_i = g_j$ , 与假设矛盾, 因此  $ug_i \neq ug_j$ , 即  $\Phi$  为单射。

综上, 映射  $\Phi: ug_\alpha \rightarrow g_\beta$  为一一映射, 又因为  $uG$  和  $G$  的元素完全一样, 因此  $uG$  中的元素仅为  $G$  中元素的重排, 即可写作  $uG = G$ 。右乘的情况同理可证。 □

**推论 1.** 乘法表每行每列都是群的重排, 即乘法表同一行和同一列不会出现相同的元素。

**推论 2.** 精确到同构, 2 阶和 3 阶群只有一种。

$C_2$	$e$	$a$
$e$	$e$	$a$
$a$	$a$	$e$

表 1.2: 2 阶群乘法表。

$C_3$	$e$	$a$	$b$
$e$	$e$	$a$	$b$
$a$	$a$	$b$	$e$
$b$	$b$	$e$	$a$

表 1.3: 3 阶群乘法表。

证明.

1. 2 阶群: 设  $G = \{e, a\}$ , 由于  $aG$  为  $G$  的重排, 只能有  $a^2 = e$ , 即 2 阶群只能为 2 阶循环群  $C_2$ , 乘法表为表 1.2。
2. 3 阶群: 设  $G = \{e, a, b\}$ , 对于乘法表表 1.3 的第二行, 因  $ab$  不能为  $b$ , 只能有  $ab = e$  和  $a^2 = b$ , 群乘法表因此唯一确定, 3 阶群只有 3 阶循环群  $C_3$  一种。

□

## 1.2 子群与陪集

我们将讨论群包含的一些结构关系。参照集合与子集的关系, 可以定义群的子群。

§ **定义 1.8. 子群** 设  $H$  是群  $G$  的一个子集 (部分元素的集合), 若对群  $G$  相同的乘法运算,  $H$  也构成一个群, 则称  $H$  为  $G$  的子群, 记作  $H < G$ 。

**注 1.** 群  $G$  的子集  $H$  为子群的充要条件为  $H$  满足封闭性, 即  $\forall h_\alpha, h_\beta \in H$ , 都有  $h_\alpha h_\beta \in H$ . 乘法的结合律在  $G$  为群时已满足; 封闭性要求任何元素的周期都在该子集中, 即  $h^k = e$ ,  $h^k = h^{-1}$  都在子集中. 故而形成子群.

**注 2.** 群  $G$  本身以及  $\{e\}$  都是  $G$  的子群, 一般称为平庸子群. 我们考虑的子群一般都为这两者外的子群, 即非平庸子群.

**例 1.23.** 整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$  为实数加群  $\{\mathbb{R}, +\}$  的子群; 偶整数加群  $\{2\mathbb{Z}, +\} = \{0, 2, \dots, 2n, \dots\}$  为整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$  的子群.

**例 1.24.**  $m$  阶置换群  $S_m$  是  $n$  阶置换群  $S_n$  的子群  $S_m < S_n$ , 其中  $m < n$ .

**例 1.25.**  $D_3$  群有 4 个非平庸子群, 分别为  $\{e, d, f\}$ 、 $\{e, a\}$ 、 $\{e, b\}$  和  $\{e, c\}$ , 其中  $\{e, d, f\}$  同构于  $C_3$  群, 而后三者同构于  $C_2$  群.

**§ 定义 1.9. 群元的阶** 对任意一个有限群  $G$ , 从中取一个元素  $a$ , 从  $a$  出发作幂操作, 总可以构成  $G$  的一个循环子群  $Z_k = \{a, a^2, \dots, a^{k-1}, a^k = e\}$ , 这时称满足这个性质的最小的  $k$  为群元  $a$  的阶.

**例 1.26.** 对于  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$ , 群元的阶分别为  $\{1, 3, 3, 2, 2, 2\}$ .

**§ 定义 1.10. 陪集** 设  $H$  是群  $G$  的子群,  $H = \{h_\alpha\}$ , 由固定的  $g \in G$ , 可生成子群  $H$  的左陪集:  $gH = \{gh_\alpha | h_\alpha \in G\}$ , 也可生成子群  $H$  的右陪集:  $Hg = \{h_\alpha g | h_\alpha \in G\}$ .

**注 1.** 陪集不是群, 陪集元素个数为子群的阶.

证明. 以左陪集为例, 只需证明当  $h_\alpha$  取遍子群  $H$  所有元素时,  $gh_\alpha$  都会给出不同的群元即可. 对于  $\forall h_\alpha, h_\beta \in H$ , 且  $h_\alpha \neq h_\beta$ , 假设  $gh_\alpha = gh_\beta$ , 则有  $g^{-1}gh_\alpha = g^{-1}gh_\beta \Rightarrow h_\alpha = h_\beta$ , 与假设矛盾. 因此  $gH$  的元素个数为  $|H|$ . 右陪集同理可证.  $\square$

**注 2.** 陪集可以是子群  $H$  本身. 若  $g \in H$ , 由重排定理知此时陪集为子群本身, 即  $gH = H$ . 右陪集同理.

当  $g \notin H$  时, 我们还能证明此时陪集与子群  $H$  无任何公共元素, 即  $gH \cap H = \emptyset$  和  $Hg \cap H = \emptyset$ . 这一点将伴随以下更强的定理一起证明.

**■ 定理 1.2. 陪集定理** 设群  $H$  是群  $G$  的子群, 则  $H$  的两个左 (或右) 陪集或者完全相同, 或者没有任何公共元素.

该定理也可表示为, 设  $H < G$ , 对于  $\forall g_1, g_2 \in G$ , 有

$$\begin{cases} g_1H \cap g_2H = \emptyset, \text{ 或} \\ g_1H = g_2H. \end{cases} \quad (1.11)$$

证明. 我们只需证明若两个左陪集  $g_1H$  和  $g_2H$  有一个公共元素时, 两个左陪集必然完全相同即可. 假设  $g_1H$  和  $g_2H$  有一个公共元素, 表示为  $g_1h_\alpha = g_2h_\beta$ , 则有  $g_2^{-1}g_1 = h_\beta h_\alpha^{-1} = h_\gamma \in H$ . 由重排定理, 可知  $g_2^{-1}g_1H = H$ , 即  $g_1H = g_2H$ . 因此两个左陪集要么没有公共元素, 要么完全相同. 对右陪集的情况同理可证.  $\square$

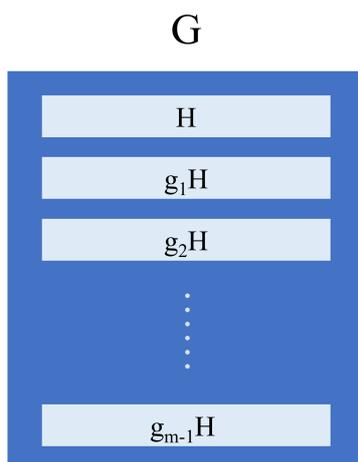


图 1.7: 群的左陪集分割示意图。

由陪集定理知, 同一陪集中的任意元素与子群  $H$  相乘都会得到该陪集。因此当找到群  $G$  的一个子群  $H$  后, 我们可以将所有群元  $g_i \in G$  与  $H$  相乘, 得到  $m$  个陪集 ( $m \leq |G|$ ), 并从每个陪集中选取一个元素, 组成陪集代表元集合  $\{g_0 = e, g_1, \dots, g_{m-1}\}$ , 其中  $e$  为陪集  $eH = He = H$  的代表元。有了子群  $H < G$  以及  $m < |G|$  个左陪集代表元  $\{g_0 = e, g_1, \dots, g_{m-1}\}$ , 我们可以对群  $G$  作左陪集分割  $G = eH \cup g_1H \cup \dots \cup g_{m-1}H$ , 如图1.7示意图所示。同理, 我们也能对群作右陪集分割。由于每个陪集的阶相等  $|g_iH| = |g_jH|$ , 群陪集分割结构的存在限制了子群  $H$  的阶数, 这便是拉格朗日 (Lagrange) 定理的内容。

■ **定理 1.3. 拉格朗日 (Lagrange) 定理** 有限群子群的阶  $|H|$ , 必为群阶  $|G|$  的因子,  $|G|/|H|$  记做子群的指数。

证明. 对于有限群  $G$  的任一个子群  $H < G$ , 因为不同的陪集没有任何公共元素, 总可以通过选取  $m$  个左陪集代表元后, 穷尽整个群  $G$ , 即  $G = eH \cup g_1H \cup \dots \cup g_{m-1}H$ 。此时群阶  $|G|$  与陪集的阶满足关系:

$$|G| = |H| + |g_1H| + \dots + |g_{m-1}H|. \quad (1.12)$$

又因为每个陪集的阶都等于子群阶  $|g_iH| = |H|$ , 以上等式变为

$$|G| = m|H|. \quad (1.13)$$

对于有限群,  $m$  和  $|H|$  都是正整数, 因此子群的阶  $|H|$  为群阶  $|G|$  的因子, 陪集个数  $m = |G|/|H|$ , 即子群  $H$  的指数, 也是群阶  $|G|$  的因子。□

由拉格朗日定理, 我们可以得到以下推论。

**推论 1.** 有限群任意群元的阶, 必为群阶的因子。

证明. 对于群  $G$  的任一个群元  $g$ , 总能用  $g$  生成一个  $k$  阶循环子群  $C_k = \{g^k = e, g, g^2, \dots, g^{k-1}\}$ , 对该子群使用拉格朗日定理, 可知群元的阶  $k$  即循环子群的阶是群阶  $G$  的因子。□

**推论 2.** 任一  $p$  阶群 ( $p$  为素数) 均同构于  $p$  阶循环群  $C_p$ 。

证明. 对于任意素数阶群  $G$ , 任取其中一个非单位元的元素  $g \in G$ , 由上一个推论知  $g$  的阶只能为素数  $p$  的因子即  $p$  本身, 因此由该元素  $g$  生成的循环子群  $H = \{g^p = e, g, g^2, \dots, g^{p-1}\}$  即为群  $G$  的子群, 且  $|G| = |H| = p$ , 所以  $G = H$ . 构造同构映射  $\Phi: g \rightarrow a$  即得  $G$  同构于  $p$  阶循环群  $C_p$ , 其中  $a$  为  $C_p$  的生成元.  $\square$

注意**推论 1** 的逆命题并不成立, 即若  $k$  是有限群阶  $G$  的因子,  $G$  并不总是存在阶为  $k$  的群元. 只有当该因子为素因子时, 才有该逆命题成立, 即以下定理.

**推论 3. 柯西 (Cauchy) 定理** 若  $p$  是一个整除群  $G$  的阶的素数, 则  $G$  至少有一个阶为  $p$  的群元.

拉格朗日定理是对群结构的很强的约束, 配合重排定理, 往往可以决定群的完整结构. 以 4 阶群为例, 我们将证明, 精确到同构, 4 阶群只有两种.

**例 1.27.** 4 阶群只有循环群  $C_4$  和 Klein 四元群  $V_4$  两种, 其中  $V_4$  是最小的非循环群.

证明. 设 4 阶群为  $G = \{e, a, b, c\}$ , 由拉格朗日定理知除  $e$  外的元素的阶只能是 2 或 4, 我们可根据  $G$  是否含有 4 阶元素进行讨论.

1. 若  $G$  中存在一个 4 阶元素, 不妨取  $|a| = 4$ , 则由  $a$  生成的循环子群  $C_4 = \{a^4 = e, a, a^2, a^3\}$  与原来的群完全相同, 另外两个非单位元元素为  $a$  的 2 次和 3 次幂, 此时的 4 阶群为 4 阶循环群.
2. 若  $G$  不含有 4 阶元素, 即  $|a| = |b| = |c| = 2$ . 由重排定理知  $ab = ba = c$ ,  $bc = cb = a$ ,  $ca = ac = b$ , 因此可容易写出  $G$  的乘法表为表 1.4, 易知其同构于 Klein 四元群.

$\square$

$V_4$	$e$	$a$	$b$	$c$
$e$	$e$	$a$	$b$	$c$
$a$	$a$	$e$	$c$	$b$
$b$	$b$	$c$	$e$	$a$
$c$	$c$	$b$	$a$	$e$

表 1.4:  $V_4$  群乘法表.

类似地, 根据拉格朗日定理, 我们能确定 6 阶群也只有两种.

**例 1.28.** 6 阶群只有循环群  $C_6$  和平面正三角形对称群  $D_3$  两种, 其中  $D_3$  是最小的非 Abel 群.

证明. 设 6 阶群为  $\{e, a, b, c, d, f\}$ , 由拉格朗日定理知除  $e$  外的元素的阶只能为 2, 3 或 6. 我们使用 Cayley 图研究群的结构, 考察阶为 2 和 3 的元素, 不妨设  $|a| = 2$  和  $|b| = 3$ . 由于  $a$  是 2 阶元素,  $a$  和  $a^{-1}$  等价, 因此我们可以用不带箭头的蓝线表示左乘  $a$ , 而  $b$  与  $b^{-1}$  不相等, 我们用带箭头的红线表示左乘  $b$ . 从单位元  $e$  出发, 6 阶群 Cayley 图两个基本单元构成, 如图 1.8(a) 所示, 其中  $b$  生成一个 3 阶循环群. 同样地, 我们可以从  $a$  元素出发, 左乘  $b$  元素, 构成另一个循环图, 如图 1.8(b) 所示.

从  $e$  出发的循环和从  $a$  出发的循环通过作用  $a$  联系起来, 剩余  $b$  和  $b^2$  与  $ba$  和  $b^2a$  的连接还需确定, 一共存在两种连接方式, 分别对应图 1.8(c) 和 (d). 对于图 1.8(c) 的情况, 可将其变形为图 1.8(e) 左列的形式, 其中内外两个循环沿着同一方向进行, 容易发现这种结构下对任意群元进行  $ab$  操作和  $ba$  操作是等价的, 因此是 Abel 群. 可以验证此结构下  $ba$  为群的生成元, 任意群元都能表示为  $ba$  的幂次, 因此此时的 6 阶群实

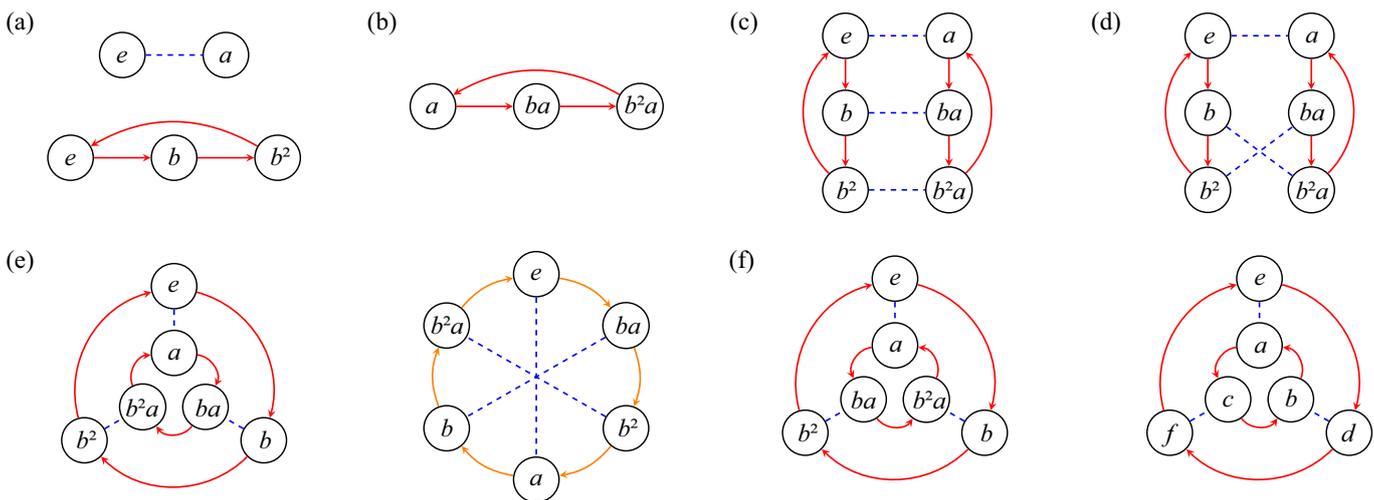


图 1.8: (a) 6 阶群 Cayley 图的两个基本单元。(b) 由  $a$  出发的循环图。(c)(d) 两种可能的连接方式。(e) 第一种连接情况对应于 6 阶循环群  $C_6$ 。(f) 第二种连接情况对应于  $D_3$  群。

际为 6 阶循环群  $C_6$  (图1.8(e) 右列)。对于图1.8(d) 的情况, 同样将其变形为图1.8(f) 左列的形式, 此时两个循环沿着相反方向进行, 这导致  $ab$  操作和  $ba$  操作会给出不同的结果, 因此是非 Abel 群。可以验证这个群的 Cayley 图和  $D_3$  群的 Cayley 图具有相同的结构, 因此此时的 6 阶群同构于  $D_3$  群, 是最小的非 Abel 群。□

实际上, 如图1.8(f) 这类由两个相反循环构成的群, 是一类特殊的群, 称为二面体群  $D_n$ , 其中  $n$  为内圈或外圈的循环子群的群阶。

**例 1.29.** 正  $n$  边形的旋转对称群称为二面体群  $D_n$  ( $n \geq 3$ )。

一个正  $n$  边形包含两种旋转轴: 一个垂直于多边形平面的  $n$  次轴, 包含  $n$  个群元  $\{e = R^n, R, R^2, \dots, R^{n-1}\}$ ;  $n$  个位于多边形平面内的 2 次轴, 同样包含  $n$  个元素  $\{S_0, S_1, \dots, S_{n-1}\}$ 。对于绕同种轴的旋转, 有关系  $R^n = S_j^2 = e$ 。现在考虑绕两种轴的相继旋转  $RS_j$ , 如图1.9(a) 所示,  $S_j$  操作下, 该轴上的  $A$  点不变, 而  $S_{j+2}$  轴上的  $B$  点变成  $S_{j-2}$  轴上的  $B'$  点; 再进行  $R$  操作,  $A$  点旋转至原  $B$  点的位置, 而  $B'$  点旋转至原  $A$  点的位置。可见联合操作  $RS_j$  交换了  $A$ 、 $B$  点, 因此为  $S_{j+1}$  操作:

$$RS_j = S_{j+1}, R^m S_j = S_{j+m}, R^m = S_{j+m} S_j, \tag{1.14}$$

具有封闭性。取逆有  $R^{-1} = S_j S_{j+1}$ ,  $R^{-m} = S_j S_{j+m}$ , 因此得到

$$S_j R S_j = S_j S_{j+1} = R^{-1}. \tag{1.15}$$

$D_n$  群可用两个生成元  $R$  和  $S_j$  通过以上关系构造:  $D_n = \{R, S \mid R^n = S^2 = e, SRS = R^{-1}\}$ 。用 Cayley 图表示出生成元间的关系如图1.9(b), 可以发现  $SRS = R^{-1}$  的确导致内外两个循环相反, 且  $RS = SR^{-1} \neq SR$  ( $n \geq 3$ ), 因此二面体群  $D_n$  在  $n \geq 3$  时是非 Abel 群 ( $D_2 \cong V_4$  是 Abel 群)。

### 1.3 不变子群和类

我们以最简单的二面体群  $D_3$  为例, 探究群更多的结构信息。已知  $D_3$  群包含 4 个非平庸子群:  $\{e, d, f\}$ 、 $\{e, a\}$ 、 $\{e, b\}$  和  $\{e, c\}$ , 我们考虑不同子群对应的陪集分割。

1. 取子群  $H_1 = \{e, a\}$ , 对应的左陪集为  $bH_1 = \{b, f\}$  和  $cH_1 = \{c, d\}$ , 而右陪集为  $H_1 b = \{b, d\}$  和  $H_1 c = \{c, f\}$ , 即  $H_1$  对应的左陪集和右陪集并不相等。

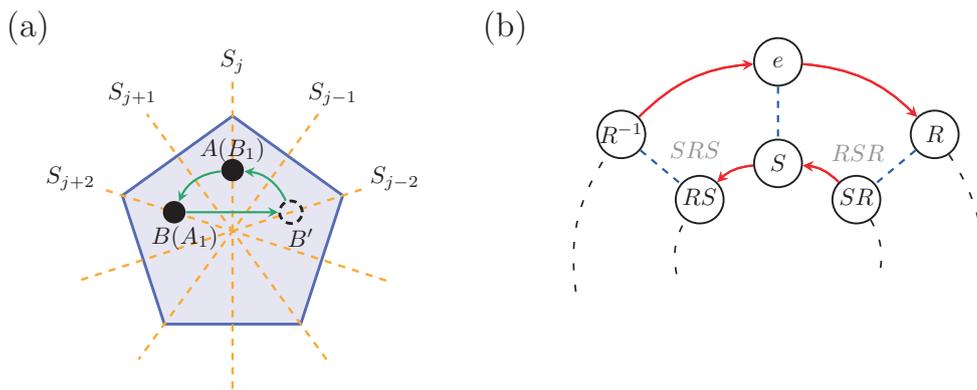


图 1.9: (a)  $D_n$  群群元间的关系。(b)  $D_n$  群生成元间关系的 Cayley 图表示。

2. 取子群  $H_2 = \{e, d, f\}$ , 对应的左陪集为  $aH_2 = \{a, b, c\}$ , 而右陪集为  $H_2a = \{a, b, c\}$ ,  $H_2$  对应的左陪集和右陪集是相同的。

因此, 对同一个群, 我们可将其子群分成两类, 一般子群的左陪集和右陪集并不相等, 而另一类特殊的子群的左陪集和右陪集是相同的, 我们将其称为不变子群。

§ 定义 1.11. 不变子群 设  $H$  是  $G$  的子群, 若对任意固定的  $f \in G$ ,  $H$  的左陪集与右陪集相等 ( $fH = Hf$ ), 则称  $H$  是  $G$  的不变子群 (正规子群), 记为  $H \triangleleft G$ 。

例 1.30. 整数加群是实数加群的不变子群,  $\{\mathbb{Z}, +\} \triangleleft \{\mathbb{R}, +\}$ , 因为加法可交换。

例 1.31.  $C_3 \triangleleft D_3$ 。

证明.  $C_3 = \{e, d, f\}$ , 对于  $\forall g \in D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$ , 有

$$gC_3 = \begin{cases} \{e, d, f\} = C_3g & \text{if } g \in \{e, d, f\}, \\ \{a, b, c\} = C_3g & \text{if } g \in \{a, b, c\}, \end{cases} \tag{1.16}$$

因此  $C_3 \triangleleft D_3$ 。 □

对于不变子群, 有以下定理。

■ 定理 1.4. 若  $H$  是  $G$  的不变子群, 那么对任意固定的  $f \in G$ , 当  $h_\alpha$  取遍  $H$  中所有元素的时候,  $fh_\alpha f^{-1}$  给出且仅仅一次给出  $H$  中所有元素。

证明. 只需证明  $fHf^{-1}$  为  $H$  的重排即可。对  $\forall h_\alpha \in H$ , 可证映射  $\Phi: fh_\alpha f^{-1} \rightarrow h_\beta$  为一一映射。

1.  $\Phi$  为满射: 对  $\forall h_\beta \in H$ , 因为  $H$  为不变子群, 故  $h_\beta f \in Hf = fH$ , 即必存在  $h_\alpha$  使得  $h_\beta f = fh_\alpha$ 。因此,  $f^{-1}h_\beta f = h_\alpha \in H$ 。所以当  $h_\alpha$  取到  $f^{-1}h_\beta f$  时,  $fh_\alpha f^{-1} = h_\beta$ , 即  $\Phi$  为满射。
2.  $\Phi$  为单射: 采用反证法, 假设  $h_\alpha, h_\beta \in H$ ,  $h_\alpha \neq h_\beta$ , 但  $fh_\alpha f^{-1} = fh_\beta f^{-1}$ , 则导致  $h_\alpha = h_\beta$ , 与假设矛盾, 因此  $fh_\alpha f^{-1} \neq fh_\beta f^{-1}$ , 即  $\Phi$  为单射。

综上,  $fHf^{-1}$  仅为  $H$  的重排。 □

由不变子群的定义及以上定理, 我们可以得到以下几个推论。

**推论 1.** *Abel* 群的所有子群都是其不变子群。

证明. 在 *Abel* 群  $G$  中, 对  $\forall H < G$ ,  $h_\alpha \in H$ ,  $f \in G$ , 都有  $fh_\alpha = h_\alpha f$ , 即  $fH = Hf$ , 所以  $H \triangleleft G$ .  $\square$

**推论 2.** 指数为 2 的子群 (群阶为  $|G|/2$ ) 必为不变子群。例如  $C_n \triangleleft D_n$ 。

证明. 记  $H < G$ , 且  $|H| = |G|/2$ , 由  $G$  可做左陪集分割  $G = eH \cup g_1H$  和右陪集分割  $G = He \cup Hg_2$ , 由陪集定理知  $eH$  和  $g_1H$ 、 $He$  和  $Hg_2$  无公共元素, 而  $eH = He$  同时包含  $G$  的一半元素, 因此  $g_1H$  和  $Hg_2$  均包含  $G$  中不属于  $H$  的另一半元素, 因此  $g_1H = Hg_2$ , 重新取右陪集代表元为  $g_1 \in Hg_2$ , 即有  $g_1H = Hg_1$ 。因此  $\forall g \in G$  都有  $gH = Hg$ , 因此  $H$  为  $G$  的不变子群。  $\square$

**推论 3.** 不变子群  $H$  的两个不同陪集中元素的乘积, 必为第三个陪集或  $H$  的元素。

证明. 对于不变子群  $H$  的两个不同的陪集  $g_iH$  和  $g_jH$ , 取  $g_ih_\alpha \in g_iH$  和  $g_jh_\beta \in g_jH$ , 则由不变子群的定义有

$$g_ih_\alpha g_jh_\beta = g_i g_j h_\alpha h_\beta = g_i g_j h_\gamma \in g_i g_j H. \quad (1.17)$$

利用反证法证明  $g_i g_j H$  为不同于  $g_iH$  和  $g_jH$  的第三个陪集或者  $H$ 。假设  $g_i g_j H = g_iH$ , 则左乘  $g_i^{-1}$  得  $g_jH = H$ , 与  $g_jH$  是陪集矛盾; 假设  $g_i g_j H = g_jH$ , 则右乘  $g_j^{-1}$  得  $H = g_i g_j H g_j^{-1} = g_iH$ , 与  $g_iH$  是陪集矛盾。因此  $g_i g_j H = g_kH$ , 当  $g_k \notin H$  时,  $g_kH$  是不同于  $g_iH$  和  $g_jH$  的第三个陪集; 当  $g_k \in H$  时,  $g_kH$  是不变子群  $H$ 。  $\square$

从以上推论, 我们发现对群以其不变子群做陪集分割后, 存在一个由不变子群及其陪集构成的新结构, 在定义集合间的乘法后, 这个结构体现出群的性质, 引申出以下的定义。

**§ 定义 1.12. 商群** 设群  $G$  有不变子群  $H$ , 以分割  $G$  群的陪集串为元素, 做成一个新的集合,  $\{H, g_1H, g_2H, \dots, g_iH, \dots\}$  集合中元素的乘法规则:  $g_iH g_jH = (g_i g_j)H$ , 则  $G$  的不变子群  $H$  生成的陪集串构成一个群, 称为不变子群  $H$  的商群, 记为  $G/H$ 。

可以通过群的四个条件来证明以不变子群  $H$  分割的陪集串  $\{H, g_1H, g_2H, \dots, g_iH, \dots\}$  在以上乘法下构成群。(1) 封闭性:  $g_iH g_jH = (g_i g_j)H = g_kH$ 。(2) 结合律:  $(g_iH g_jH) g_kH = (g_i g_j g_k)H = g_iH (g_jH g_kH)$ 。(3) 单位元:  $H g_iH = g_iH H = g_iH$ 。(4) 逆元:  $g_i^{-1}H g_iH = g_iH g_i^{-1}H = H$ 。可见其中不变子群  $H$  充当单位元的地位。商群的结构为一种不变子群陪集串到由新元素组成的群的同构关系, 如图1.10所示。我们将通过以下的例子说明仅有以不变子群分割的陪集串才能定义商群, 因为乘法规则  $g_iH g_jH = (g_i g_j)H$  依赖于不变子群左陪集等于右陪集的性质,  $g_jH = Hg_j$ 。

**例 1.32.** 以  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  群的两个子群  $H_1 = \{e, a\}$  和  $H_2 = \{e, d, f\}$  做的陪集串分割是否都能构成商群?

1. 以  $H_1 = \{e, a\}$  为子群, 可以对  $D_3$  做左陪集分割  $\{H_1 = \{e, a\}, bH_1 = \{b, f\}, cH_1 = \{c, d\}\}$ 。对于集合间的乘法  $G_1 \cdot G_2 = \{g_\alpha g_\beta | \forall g_\alpha \in G_1, g_\beta \in G_2\}$ , 有

$$H_1 \cdot bH_1 = \{e, a\} \cdot \{b, f\} = \{b, d, f, c\}, \quad H_1 \cdot cH_1 = \{e, a\} \cdot \{c, d\} = \{c, f, d, b\}. \quad (1.18)$$

可见以  $H_1 = \{e, a\}$  分割的陪集串不满足封闭性, 并不构成群。

陪集串  $\rightarrow$  新元素

$g_0H$	$f_0$
$g_1H$	$f_1$
$g_2H$	$f_2$
$\vdots$	$\vdots$
$g_iH$	$f_i$
$\vdots$	$\vdots$

图 1.10: 商群结构定义的同构关系。

2. 以  $H_2 = \{e, d, f\}$  为子群, 对  $D_3$  做左陪集分割  $\{H_2 = \{e, d, f\}, aH_2 = \{a, b, c\}\}$ , 可以验证

$$\begin{aligned}
 H_2 \cdot H_2 &= \{e, d, f\} \cdot \{e, d, f\} = \{e, d, f\} = H_2, \\
 H_2 \cdot (aH_2) &= \{e, d, f\} \cdot \{a, b, c\} = \{a, b, c\} = aH_2 = (aH_2) \cdot H_2, \\
 (aH_2) \cdot (aH_2) &= \{a, b, c\} \cdot \{a, b, c\} = \{e, d, f\} = H_2.
 \end{aligned}
 \tag{1.19}$$

因此定义同构映射  $H_2 \rightarrow f_0, aH_2 \rightarrow f_1$  后,  $\{f_0, f_1\}$  构成一个群, 群乘法表为

	$f_0$	$f_1$
$f_0$	$f_0$	$f_1$
$f_1$	$f_1$	$f_0$

该群与二阶循环群  $C_2$  同构, 因此由  $D_3$  的不变子群  $H_2 = \{e, d, f\} \cong C_3$  分割得到的陪集串  $\{H_2, aH_2\}$  在这种集合乘法下构成商群, 且该商群同构于  $C_2$ , 即  $D_3/C_3 \cong C_2$ 。

3. 这个结果可以进一步推广到任意二面体群  $D_n$ 。由定理 1.4 的推论 2,  $C_n$  是  $D_n$  的指数为 2 的子群, 因此也是不变子群  $C_n \triangleleft D_n$ , 所定义的商群同构于阶是 2 的群, 即二阶循环群:  $D_n/C_n \cong C_2$ 。

以上从群的不变子群和陪集得到商群结构, 刻画的是群中集合与集合之间的联系, 以下我们来考虑群中不同元素之间联系。为了探究元素间的关联, 我们引入共轭的概念。

**§ 定义 1.13. 共轭** 对于群  $G$  中两个元素  $f, h$ , 如果在  $G$  中存在一个  $g$ , 使得  $f, h$  可以通过  $gfg^{-1} = h$  联系起来, 则称  $f, h$  共轭, 记为  $f \sim h$ 。

**注.** 共轭的基本性质

1. 相互性: 若  $f \sim h$ , 则  $h \sim f$ 。因为若  $\exists g \in G$ , 使得  $gfg^{-1} = h$ , 则  $g^{-1}h(g^{-1})^{-1} = f$ , 且  $g^{-1} \in G$ 。
2. 传递性: 若  $f_1 \sim f_2, f_2 \sim f_3$ , 则  $f_1 \sim f_3$ 。因为若存在  $\exists g, h \in G$ , 使得  $gf_1g^{-1} = f_2, hf_2h^{-1} = f_3$ , 则  $hgf_1(hg)^{-1} = f_3$ , 且  $hg \in G$ 。

有了共轭的定义后, 我们可以定义由相互共轭的群元所构成的集合。

§ 定义 1.14. 类 群  $G$  中所有相互共轭的元素形成的集合, 称为群  $G$  的一个类。

注 1. 单位元自成一类。

证明. 因为对于  $\forall g \in G$ ,  $geg^{-1} = e$ , 即单位元只和自身共轭。□

注 2.  $Abel$  群所有群元自成一类。

证明. 对于  $Abel$  群  $G$ ,  $\forall g, f \in G$  都有  $gfg^{-1} = f$ , 即所有群元只和自身共轭。□

注 3. 同类元素的阶相同。

证明. 若  $f \in G$  且  $f^m = e$ ,  $\forall g \in G$ ,  $f$  的同类元素为  $gfg^{-1}$ , 则  $(gfg^{-1})^m = gf^mg^{-1} = e$ , 因此  $f$  的同类元素的阶与  $f$  的阶相同。□

注意以上命题的逆命题不一定成立, 即阶相同的群元不一定为同类元素。如 Klein 四元群中除单位元外所有群元都是 2 阶元素, 但都自成一类。

注 4.  $\forall f, g \in G$ ,  $fg \sim gf$ 。

证明.  $fg = fg(ff^{-1}) = f(gf)f^{-1}$ , 即  $fg$  与  $gf$  (出现在乘法表关于对角线对称位置的两个群元) 共轭。□

例 1.33.  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的类分割。

单位元  $\{e\}$  自成一类。根据乘法表发现

$$ede^{-1} = ddd^{-1} = fdf^{-1} = d, \quad ada^{-1} = bdb^{-1} = cdc^{-1} = f, \quad (1.20)$$

即  $\{d, f\}$  为一类。而

$$eae^{-1} = a, \quad dad^{-1} = b, \quad faf^{-1} = c, \quad (1.21)$$

即  $\{a, b, c\}$  为一类。所以  $D_3$  的类分割为  $\{\{e\}, \{d, f\}, \{a, b, c\}\}$ 。可见  $D_3$  的类分割与子群、陪集分割并不相同。

我们知道拉格朗日定理限制子群的阶为群阶的因子, 相应地, 每个类中元素的个数也受到一定的限制。

■ 定理 1.5. 有限群的每个类中元素的个数都是群阶的因子。

在证明该定理前, 我们先以  $D_3$  群为例考察以上定理和拉格朗日定理的关联。因为  $\{d, f\}$  为一类, 我们知道  $\forall g \in D_3$ ,  $gdg^{-1}$  可以为  $d$  或  $f$ 。我们考察分别满足  $gdg^{-1} = d$  和  $gdg^{-1} = f$  的群元  $g$  组成的集合, 发现分别为  $\{e, d, f\}$  和  $\{a, b, c\}$ , 而二者恰好为  $D_3$  的一个子群和相应的陪集。同样地, 因为  $\{a, b, c\}$  为一类, 从  $a$  出发, 我们再考察分别满足  $gag^{-1} = a$ ,  $gag^{-1} = b$  及  $gag^{-1} = c$  的群元组成的集合, 分别为  $\{e, a\}$ ,  $\{c, d\}$  和  $\{b, f\}$ , 恰好为以  $\{e, a\}$  为子群的陪集分解。因此我们发现满足  $gfg^{-1} = f$  的所有  $g$  构成有限群的一个子群, 满足  $gfg^{-1}$  等于其他共轭元素的  $g$  构成该子群的陪集, 因此可以在此子群、陪集分割上使用拉格朗日定理。该定理详细的证明如下。

证明. 我们分两步证明以上定理。

1. 取定有限群  $G$  中的一个群元  $g$ , 所有与  $g$  互易的元素  $h$  ( $hg = gh$ ) 构成一个群, 记为  $H_g$ 。由于存在单位元和结合律是显然的, 现证明该集合是封闭和有逆元的。(1) 封闭性: 假设  $h_1g = gh_1$ ,  $h_2g = gh_2$ , 则  $(h_1h_2)g = g(h_1h_2)$ , 即  $h_1h_2 \in H_g$ 。(2) 有逆元: 若  $hg = gh$ , 则  $g = h^{-1}gh$ , 右乘  $h^{-1}$  得  $gh^{-1} = h^{-1}g$ , 即  $h^{-1} \in H_g$ 。  $H_g$  是群  $G$  的一个 Abel 子群。
2. 以  $H_g$  对  $G$  作左陪集分割  $\{H_g, g_1H_g, \dots, g_{m-1}H_g\}$ , 可以证明陪集  $g_iH_g$  中的所有元素对  $g$  给出相同的共轭元素, 而不同陪集  $g_iH_g$  和  $g_jH_g$  中的元素给出  $g$  不同的共轭元素。(1) 同一陪集给出相同的共轭元素:  $\forall g_ih \in g_iH_g, h \in H_g$ , 其对  $g$  给出共轭元素为  $(g_ih)g(g_ih)^{-1} = g_ihgh^{-1}g_i^{-1} = g_ihg_i^{-1}$ , 其中  $g_i$  为陪集代表元。(2) 不同陪集给出不同的共轭元素: 设  $g_iH_g$  和  $g_jH_g$  为不同的陪集, 给出  $g$  的共轭元素分别为  $g_ihg_i^{-1}$  和  $g_jhg_j^{-1}$ 。采取反证法, 若  $g_ihg_i^{-1} = g_jhg_j^{-1}$ , 则  $g_j^{-1}g_ihg_i^{-1}g_j = (g_j^{-1}g_i)g(g_j^{-1}g_i)^{-1} = g$ , 即  $g_j^{-1}g_i$  与  $g$  可互易,  $g_j^{-1}g_i \in H_g$ , 由重排定理有  $g_j^{-1}g_iH_g = H_g$ , 或  $g_iH_g = g_jH_g$ , 与假设矛盾。因此  $g_ihg_i^{-1}$  和  $g_jhg_j^{-1}$  为  $g$  不同的共轭元素。

因此包含  $g$  的类中元素的个数为陪集分割中陪集 (含子群) 的个数, 由拉格朗日定理知类元素的个数为  $|G|/|H_g| = m$ , 也是群阶  $|G|$  的因子。  $\square$

在引入类的定义后, 我们可以发现不变子群的另一个重要性质, 也可以认为是从另一个方面定义不变子群。

■ **定理 1.6.** 若  $H$  是  $G$  的不变子群, 那么  $H$  中所有元素的同类元素都属于  $H$ 。即  $H$  由  $G$  中的一个或几个完整的类构成。

证明. 因为  $H \triangleleft G$ , 所以对于  $\forall g \in G$ , 都有  $gH = Hg$ , 因此对任意  $h_\alpha \in H$ , 其同类元素  $gh_\alpha g^{-1} = h_\beta g g^{-1} = h_\beta \in H$ , 即不变子群  $H$  所有元素的同类元素都属于  $H$ 。  $\square$

该定理给出一种更容易找到不变子群的方法, 即通过群的类分割寻找  $G$  的不变子群。特别是在研究对称变换群时, 通过操作的共轭关系继而寻找不变子群是十分常用的方法。

对称变换群的群元是对称变换, 最为常见的是绕定轴旋转特定角度的操作, 如  $R = C_n(\frac{2\pi}{N})$  表示绕  $\mathbf{n}$  轴逆时针旋转  $2\pi/N$  角的操作, 即  $\mathbf{n}$  为系统的  $N$  次转轴 (注意转轴是区分方向的)。下面我们进一步通过对称变换来研究相互共轭的群元存在的特性。若操作  $S$  将  $\mathbf{n}$  转动至  $\mathbf{m}$  方向, 即  $S: \mathbf{n} \rightarrow \mathbf{m}$ , 则有  $SRS^{-1} = R' = C_m(\frac{2\pi}{N})$ 。由此可知互相共轭的群元  $R$  与  $R'$  的对称轴通过另一群元  $S$  连接, 且  $R$  与  $R'$  的转角相同。

**注 1.** 若两个同次轴的正方向可以通过对称群的元素联系起来, 则此两转动轴称为等价轴。

**注 2.** 等价轴一定是同次轴 (反之不一定)。

以上两点可表述为, 即若  $\mathbf{n}$  为  $N$  次转轴, 操作  $S$  使得  $S: \mathbf{n} \rightarrow \mathbf{m}$ , 则  $\mathbf{m}$  同样为  $N$  次转轴, 且  $\mathbf{m}$  为  $\mathbf{n}$  的等价轴。

**注 3.** 若一个  $N$  次轴的正反两个方向可以通过对称群中的元素联系起来, 即正反两个方向的  $N$  次轴互相等价, 则此轴称为双向轴; 反之, 此轴称为极性轴。

以上性质也可表述为, 对于  $R = C_n(\frac{2\pi}{N})$ , 若存在操作  $S$  使得  $SRS^{-1} = R^{-1} = C_n(-\frac{2\pi}{N})$ , 则称  $\mathbf{n}$  为双向轴。极性的概念用来区分正反转方向, 一个特殊的例子是二次轴的正反转是相同变换操作, 因此无极性的概念。

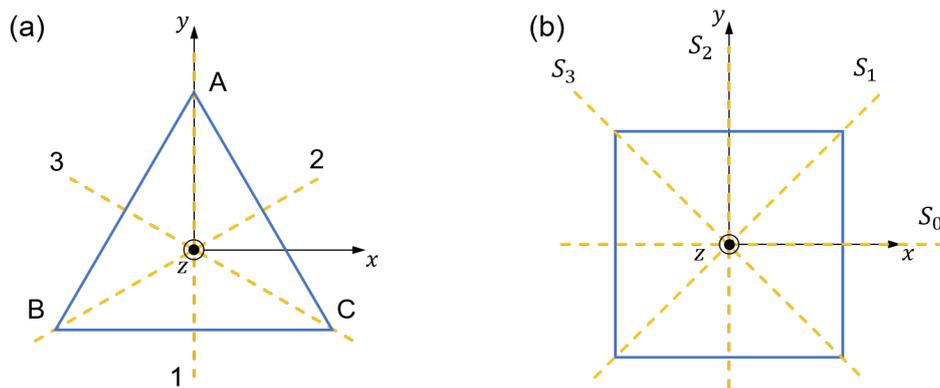


图 1.11: (a) 正三角形包含一个三次轴和三个二次轴。(b) 正四边形包含一个四次轴和四个二次轴。

注 4. 绕等价轴转动相同角度的变换互相共轭。

注 5. 绕双向轴转动正负相同角度的变换互相共轭。

绕等价轴转动不同角度的变换不共轭，绕不等价轴转动相同角度的变换也不共轭。有了等价轴和双向轴的概念，我们可以直接地对对称变换群的元素进行分类，步骤为：(1) 寻找等价轴；(2) 寻找等价轴的同转角元素。

重新考虑  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的类分割。 $D_3$  群包含保持正三角形不变的转动操作，易知其有一个三次轴和三个二次轴，如图1.11(a) 所示。因为绕平行面内的轴旋转  $\pi$  的操作将绕三次轴正负转动联系起来，因此三次轴为双向轴， $d \sim d^{-1} = f$ ，即  $\{d, f\}$  为一类。同时，三个二次轴由绕  $z$  轴的旋转联系起来，因此 1, 2, 3 轴为等价轴，绕等价轴旋转相同角度的操作为共轭操作，即  $\{a, b, c\}$  为一类。所以  $D_3$  的类分割为  $\{\{e\}, \{d, f\}, \{a, b, c\}\}$ 。

例 1.34.  $D_4$  群的类分割及真不变子群。

$D_4$  群包含保持正四边形不变的转动操作，而正四边形具有一个四次轴而三个二次轴，如图1.11(b) 所示。记  $D_4 = \{e, R, R^2, R^3, S_0, S_1, S_2, S_3\}$ ，其中  $R$  为绕  $z$  轴旋转  $\pi/2$  的操作， $S_i$  为绕平行面内的轴旋转  $\pi$  的操作。因  $S_i$  将四次轴的正负转动联系起来，所以四次轴为双向轴， $R \sim R^{-1} = R^3$ ， $R^2 \sim (R^2)^{-1} = R^2$ ，所以  $\{R, R^3\}$  和  $\{R^2\}$  组成两个类。对于二次轴，绕  $z$  轴的旋转操作将穿过正四边形对边中点的二次轴联系起来，即  $S_0 \sim S_2$ ，同时也将穿过对角的二次轴联系起来，即  $S_1 \sim S_3$ ，所以  $\{S_0, S_2\}$  和  $\{S_1, S_3\}$  也组成两个类。因此  $D_4$  的类分割为  $\{\{e\}, \{R, R^3\}, \{R^2\}, \{S_0, S_2\}, \{S_1, S_3\}\}$ 。

由拉格朗日定理知  $D_4$  子群的阶只能为 1, 2, 4, 8，即其真不变子群的阶为 2 或 4。因此  $D_4$  真不变子群为  $\{e, R^2\} \cong C_2$ ， $\{e, R, R^2, R^3\} \cong C_4$ ， $\{e, R^2, S_0, S_2\} \cong V_4$ ，及  $\{e, R^2, S_1, S_3\} \cong V_4$ 。

例 1.35.  $D_n$  群的类分割及不变子群。

$D_n$  群包含保持正  $n$  边形不变的纯转动操作，具有一个  $n$  次轴和  $n$  个二次轴。从  $D_3$  和  $D_4$  的例子可见， $D_n$  群在  $n$  为奇数和偶数时具有不同的结构，当  $n$  为奇数时，所有二次轴为等价轴；当  $n$  为偶数时，二次轴可以分为过对角顶点和过对边中点的两类。

$n$  为偶数时， $D_{2n} = \{e, R, R^2, \dots, R^{2n-1}, S_0, S_1, \dots, S_{2n-1}\}$ 。 $2n$  次轴为双向轴，因此  $\{R^m, R^{2n-m}\}$  为  $n-1$  个类( $1 \leq m < n$ )， $\{R^n\}$  自成一类， $\{S_0, S_2, \dots, S_{2n-2}\}$  和  $\{S_1, S_3, \dots, S_{2n-1}\}$  为两类，加上  $\{e\}$  自成一类， $D_{2n}$  一共有  $n+3$  个类。真不变子群为  $C_n = \{e, R, R^2, \dots, R^{2n-1}\}$  及其子群； $\{e, R^2, \dots, R^{2(n-1)}, S_0, S_2, \dots, S_{2n-2}\}$  和  $\{e, R^2, \dots, R^{2(n-1)}, S_1, S_3, \dots, S_{2n-1}\}$ ，因都包含一个  $n$  次轴和  $n$  个二次轴，故同构于  $D_n$ 。

$n$  为奇数时,  $D_{2n+1} = \{e, R, R^2, \dots, R^{2n}, S_0, S_1, \dots, S_{2n+1}\}$ 。  $2n+1$  次轴为双向轴,  $\{R^m, R^{2n+1-m}\}$  为  $n$  个类 ( $1 \leq m \leq n$ ),  $\{S_0, S_1, \dots, S_{2n+1}\}$  为一类, 加上  $\{e\}$  自成一类,  $D_{2n+1}$  一共有  $n+2$  个类。真不变子群只能为  $C_{2n+1} = \{e, R, R^2, \dots, R^{2n}\}$  及其子群, 因为包含  $\{S_0, S_1, \dots, S_{2n+1}\}$  的不变子群至少含有  $2n+2$  个元素, 只可能为  $D_{2n+1}$  本身。

## 1.4 同构与同态

在分析了一个群中集合与集合、群元与群元间的关系后, 我们将关心不同的群之间的关系。此前, 我们曾定义了群之间的同构关系。

§ 定义 1.7. 同构 若从群  $G$  到群  $F$  上, 存在一一对应的满映射  $\Phi$ , 且这个映射本身保持群的乘法运算规律不变, 则称群  $G$  与群  $F$  同构, 记作  $G \cong F$ 。映射  $\Phi$  称为同构映射。

指的是注意的是, 同构映射与即将介绍的同态映射本身在数学上并不要求是满映射, 而两个群之间的同构与同态关系要求满映射。因此之后为简单起见, 我们只考虑满映射的情况。

注 1. 若同构映射  $\Phi$  使得  $G \cong F$ ,  $g_0$  和  $f_0$  分别为  $G$  和  $F$  中的单位元, 则  $\Phi(g_0) = f_0$ 。

证明.  $\forall g \in G, \Phi(g) = \Phi(gg_0) = \Phi(g)\Phi(g_0)$ , 左乘  $[\Phi(g)]^{-1} \in F$  得  $\Phi(g_0) = f_0$ 。 □

注 2.  $\Phi(g^{-1}) = [\Phi(g)]^{-1}$ 。

证明.  $\forall g \in G, f_0 = \Phi(g_0) = \Phi(g^{-1}g) = \Phi(g^{-1})\Phi(g) = \Phi(g)\Phi(g^{-1})$ , 因此  $[\Phi(g)]^{-1} = \Phi(g^{-1})$ 。 □

注 3. 若同构映射  $\Phi$  使得  $G \cong F$ , 则逆映射  $\Phi^{-1}$  使得  $F \cong G$ 。

证明. 由  $\Phi$  为保持乘法关系的一一映射易证。 □

例 1.36. 空间反演群  $\{E, I\}$  同构于 2 阶循环群  $C_2$ 。

例 1.37. 3 阶置换群  $S_3$  同构于 3 阶二面体群  $D_3$ , 见例 1.20。

例 1.38. 整数模  $n$  加法群  $Z_n = \{0, 1, \dots, n-1\}$  同构于  $n$  阶循环群, 见例 1.21。

有时也将  $Z_n$  称为  $\mathbb{Z}/n\mathbb{Z}$ , 即整数加群  $\mathbb{Z}$  对  $n\mathbb{Z} = \{0, n, 2n, \dots\}$  的商群。以  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z}$  为例, 整数加群为  $\mathbb{Z} = \{0, 1, 2, \dots\}$ , 而  $2\mathbb{Z} = \{0, 2, 4, \dots\}$  为  $\mathbb{Z}$  的不变子群 (Abel 群的子群), 因此可将  $\mathbb{Z}$  分割为不变子群  $2\mathbb{Z}$  和陪集  $1 \cdot 2\mathbb{Z} = \{1, 3, 5, \dots\}$ , 同构映射  $\Phi$  将不变子群和陪集分别映射为  $f_0$  和  $f_1$ , 即商群同构于 2 阶循环群  $\mathbb{Z}/2\mathbb{Z} \cong C_2$ 。

同构映射要求两个群间存在一一映射关系, 这是一个很强的结构关系, 普遍而言很少群能满足。因此, 可以放宽一一映射的条件为满映射, 从而定义一种新的群之间的关系。

§ 定义 1.15. 同态 设存在从群  $G$  到群  $F$  的满映射  $\Phi$ , 且这个映射本身保持群的乘法运算规律不变, 则称群  $G$  与群  $F$  同态, 记作  $G \sim F$ 。映射  $\Phi$  称为同态映射。

同构映射与同态映射关系类似于三角形间全等与相似的关系, 同构映射是同态映射的特例, 如图 1.12 所示。值得注意的是, 数学上, 同态关系不一定要是满映射, 只需要保持乘法关系; 但是物理上关注的是群表示论, 因此要求为满映射。另外, 同态映射是不可逆的, 因为给定一个像  $f \in F$ , 其  $G$  中的原像并不唯一。

虽然同态关系不如同构关系般具有相当强的结构, 但保持乘法关系的要求使其也具有一定的结构。为此, 我们考察同态映射中像为单位元的集合。

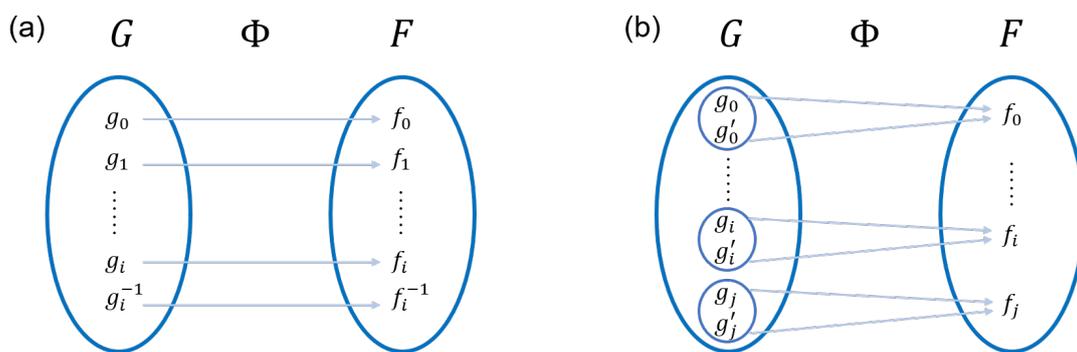


图 1.12: (a) 群同构关系图。(b) 群同态关系图。

§ 定义 1.16. 同态核 设  $G$  与  $F$  同态, 那么  $G$  中与  $F$  的单位元素对应的所有元素的集合称为同态核, 记为  $\text{Ker}(G)$ 。

对照图1.12(b), 同态核就是就是第一个小圈, 满足  $\Phi : \text{Ker}(G) \rightarrow f_0$ 。同态关系的结构约束反映为以下的定理。

■ 定理 1.7. 同态核定理 设  $G$  与  $F$  同态, 则有:

1. 同态核  $H$  是  $G$  的不变子群。
2. 商群  $G/H$  与  $F$  同构。

证明. 对于第一点, 我们先证明  $H$  是子群, 再证明  $H$  是不变子群。

1. 为了证明  $H < G$ , 只需证明封闭性和存在逆元素即可。(1) 封闭性: 若  $h_\alpha, h_\beta \in H = \text{Ker}(G)$ , 则  $\Phi(h_\alpha h_\beta) = \Phi(h_\alpha) \Phi(h_\beta) = f_0 f_0 = f_0$ , 即  $h_\alpha h_\beta \in H$ 。(2) 有逆元素: 若  $h_\alpha \in H$ , 则  $\Phi(g_0) = \Phi(h_\alpha^{-1} h_\alpha) = \Phi(h_\alpha^{-1}) \Phi(h_\alpha) = \Phi(h_\alpha^{-1}) f_0 = f_0$ , 即  $\Phi(h_\alpha^{-1}) = f_0$ , 所以  $h_\alpha^{-1} \in H$ 。
2. 再证明  $H \triangleleft G$ 。对  $\forall h_\alpha \in H = \text{Ker}(G), \forall g \in G$ , 需要证明  $gh_\alpha g^{-1} \in H$ 。 $\forall g \in G, \Phi(gh_\alpha g^{-1}) = \Phi(g) \Phi(h_\alpha) \Phi(g^{-1}) = \Phi(g) f_0 \Phi(g^{-1}) = f_0$ , 即  $gh_\alpha g^{-1} \in H$ , 所以  $H$  是由完整的类构成的子群, 因此  $H \triangleleft G$ 。

对于第二点, 需要构成商群  $G/\text{Ker}(G)$  和  $F$  之间的一一映射。已证  $H = \text{Ker}(G)$  为  $G$  的不变子群, 对  $G$  作陪集分割  $\{H, g_1 H, \dots, g_i H, \dots\}$ 。

1. 证明对同一陪集  $g_i H$  中的元素, 同态映射  $\Phi$  将其映射为相同的元素  $f_i \in F$ 。因为陪集  $g_i H$  中的元素可表示为  $g_i h_\alpha, h_\alpha \in H, \Phi(g_i h_\alpha) = \Phi(g_i) \Phi(h_\alpha) = \Phi(g_i) f_0 = f_i$ 。
2. 证明对不同的陪集  $g_i H$  和  $g_j H$  中的元素, 同态映射  $\Phi$  将其映射为  $F$  中不同的元素  $f_i$  和  $f_j$ 。采用反证法, 假设  $g_i H$  和  $g_j H$  为不同的陪集, 但  $\Phi(g_i h_\alpha) = \Phi(g_j h_\alpha)$ , 则有  $\Phi(g_j^{-1} g_i) = \Phi(h_\alpha) = f_0$ , 即  $g_j^{-1} g_i \in H, g_i \in g_j H$ , 由陪集定理有  $g_i H$  和  $g_j H$  完全相同, 与  $g_i H$  和  $g_j H$  为不同的陪集矛盾。
3. 最后证明该映射为满映射, 即任意  $f_i \in F$ , 都能在商群  $G/H$  中找到原像。因为  $G \sim F$ , 对于任意的  $f_i \in F$ , 都能找到至少一个  $g_{i'} \in G$ , 满足  $\Phi(g_{i'}) = f_i$ 。虽然  $g_{i'}$  不一定为陪集代表元, 但由第 1 点知同态映射  $\Phi$  会将  $g_{i'}$  所在的陪集  $g_{i'} H$  的元素都映射为  $f_i$ , 因此陪集  $g_{i'} H$  为  $f_i$  在商群中的原像。

因此, 由  $G$  到  $F$  的同态映射  $\Phi$  可定义一个从商群  $G/\text{Ker}(G)$  到  $F$  的一一映射  $\Psi$ , 且该映射保持群的乘法结构不变, 即  $G/\text{Ker}(G) \cong F$ . □

**例 1.39.**  $D_3 \sim C_2, D_3/C_3 \cong C_2$ .

证明. 先证同态关系. 定义映射关系  $\Phi(e) = \Phi(d) = \Phi(f) = f_0, \Phi(a) = \Phi(b) = \Phi(c) = f_1$ , 发现有

$D_3$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$	$\Rightarrow$	$\Phi(g_1g_2)$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$	$\Rightarrow$	$C_2$	$f_0$	$f_1$
$e$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$		$e$	$f_0$	$f_0$	$f_0$	$f_1$	$f_1$	$f_1$		$f_0$	$f_0$	$f_1$
$d$	$d$	$f$	$e$	$c$	$a$	$b$		$d$	$f_0$	$f_0$	$f_0$	$f_1$	$f_1$	$f_1$		$f_0$	$f_0$	$f_1$
$f$	$f$	$e$	$d$	$b$	$c$	$a$		$f$	$f_0$	$f_0$	$f_0$	$f_1$	$f_1$	$f_1$		$f_0$	$f_0$	$f_1$
$a$	$a$	$b$	$c$	$e$	$d$	$f$		$a$	$f_1$	$f_1$	$f_1$	$f_0$	$f_0$	$f_0$		$f_1$	$f_1$	$f_0$
$b$	$b$	$c$	$a$	$f$	$e$	$d$		$b$	$f_1$	$f_1$	$f_1$	$f_0$	$f_0$	$f_0$		$f_1$	$f_1$	$f_0$
$c$	$c$	$a$	$b$	$d$	$f$	$e$		$c$	$f_1$	$f_1$	$f_1$	$f_0$	$f_0$	$f_0$		$f_1$	$f_1$	$f_0$

因此该映射是一个从  $D_3$  到  $C_2$  的满映射, 所以  $D_3 \sim C_2$ .

再证  $D_3/C_3 \cong C_2$ .  $C_3 = \{e, d, f\}$  是不变子群, 也是映射  $\Phi$  下的同态核. 商群为  $D_3/C_3 = \{C_3, aC_3\} = \{\{e, d, f\}, \{a, b, c\}\}$ , 定义一一映射  $\Psi(C_3) = f_0, \Psi(aC_3) = f_1$ . 显然  $\Psi(C_3)\Psi(C_3) = \Psi(C_3 \cdot C_3) = \Psi(C_3) = f_0, \Psi(aC_3)\Psi(aC_3) = \Psi(aC_3 \cdot aC_3) = \Psi(\{a, b, c\} \cdot \{a, b, c\}) = \Psi(\{e, d, f\}) = f_0, \Psi(C_3)\Psi(aC_3) = \Psi(C_3 \cdot aC_3) = \Psi(\{a, b, c\}) = f_1 = \Psi(aC_3)\Psi(C_3)$ . 因此, 该映射是一个从商群  $D_3/C_3 = \{C_3, aC_3\}$  到  $C_2 = \{f_0, f_1\}$  的保持乘法关系的一一映射, 因此  $D_3/C_3 \cong C_2$ . □

### 1.5 直积与直积因子

两个群除了同构和同态两种对比关系外, 还可以有群之间的运算关系, 即可以通过已知的群构造新的群, 类似于数之间的乘法运算. 为此, 我们引入直积群的概念.

**§ 定义 1.17. 直积群** 两个群  $G_1$  与  $G_2$ , 各贡献一个群元,  $g_{1\alpha}$  与  $g_{2\beta}$ , 形成一个有序对  $g_{\alpha\beta} = (g_{1\alpha}, g_{2\beta})$ . 这些有序对形成一个集合, 如我们进一步定义这个集合中两个元素  $g_{\alpha\beta} = (g_{1\alpha}, g_{2\beta})$  与  $g_{\alpha'\beta'} = (g_{1\alpha'}, g_{2\beta'})$  在进行乘法时, 满足的规则是  $g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'} = (g_{1\alpha}, g_{2\beta})(g_{1\alpha'}, g_{2\beta'}) = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}, g_{2\beta}g_{2\beta'})$ , 那么这个集合形成  $G_1$  与  $G_2$  的直积群  $G$ , 记为  $G_1 \otimes G_2$ .

容易验证如此定义的元素和乘法构成群。(1) 封闭性:  $\forall g_{1\alpha}, g_{1\alpha'} \in G_1, g_{2\beta}, g_{2\beta'} \in G_2, (g_{1\alpha}, g_{2\beta}), (g_{1\alpha'}, g_{2\beta'}) \in G = G_1 \otimes G_2$ , 因为  $g_{1\alpha}g_{1\alpha'} \in G_1, g_{2\beta}g_{2\beta'} \in G_2$ , 所以  $g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'} = (g_{1\alpha}g_{1\alpha'}, g_{2\beta}g_{2\beta'}) \in G$ . (2) 结合律: 因为  $G_1$  和  $G_2$  的乘法运算都满足结合律, 显然  $(g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'})g_{\alpha''\beta''} = g_{\alpha\beta}(g_{\alpha'\beta'}g_{\alpha''\beta''})$ . (3) 单位元: 若  $g_{10}$  和  $g_{20}$  分别为  $G_1$  和  $G_2$  的单位元, 则  $g_{00} = (g_{10}, g_{20})$  为  $G = G_1 \otimes G_2$  的单位元. (4) 逆元素: 对于任意  $g_{\alpha\beta} = (g_{1\alpha}, g_{2\beta}) \in G$ , 都有  $g_{\alpha\beta}^{-1} = (g_{1\alpha}^{-1}, g_{2\beta}^{-1}) \in G$ , 满足  $g_{\alpha\beta}g_{\alpha\beta}^{-1} = g_{\alpha\beta}^{-1}g_{\alpha\beta} = g_{00}$ .

**注.** 以上直积群的定义并不要求两个群  $G_1$  和  $G_2$  的乘法是相同的, 也不要求群元素是相同类型的元素, 形成有序对只是将两个元素“放在一起”. 如可以利用  $D_3$  群和整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$  构成直积群  $D_3 \otimes \{\mathbb{Z}, +\}$ , 群元是诸如  $(d, 2)$  的元素, 这里  $D_3$  和  $\{\mathbb{Z}, +\}$  无论是元素和乘法类型都不相同. 原则上直积群  $G = G_1 \otimes G_2$  的构造并不要求  $G_1$  和  $G_2$  有任何关联, 但一个特殊情况是  $G_1$  和  $G_2$  的元素类型相同, 且群乘法也相同, 这时就可将有序对  $(g_{1\alpha}, g_{2\beta})$  进一步定义为两个群群元的乘法  $g_{1\alpha}g_{2\beta}$  (对两个元素的乘法要求可交换, 具体见直积因子部分), 这也是我们一般关心的情况.

**例 1.40.** Klein 四元群是最简单的直积群  $V_4(D_2) = C_2 \otimes C_2$ 。

证明. 取两个  $C_2$  群分别为  $\{e, a\}$  和  $\{e, b\}$ , 满足  $a^2 = b^2 = e$ . 因此有  $\{e, a\} \otimes \{e, b\} = \{(e, e), (a, e), (e, b), (a, b)\}$ , 该群与  $V_4$  有相同的乘法表, 即  $V_4 = C_2 \otimes C_2$ .  $\square$

由直积群的定义, 我们知道如何从较小的群构造较大的群的方法. 一个相反的问题是, 我们如何判断较大的群是否能表示成两个较小的群的直积? 为此, 我们有直积因子的概念。

**§ 定义 1.18. 直积因子** 一个群  $G$ , 有两个子群  $G_1$  与  $G_2$ , 如果  $G$  中的任何一个元素都可以唯一地表示为  $g_{\alpha\beta} = g_{1\alpha}g_{2\beta}$ , 其中  $g_{1\alpha}$  属于  $G_1$ 、 $g_{2\beta}$  属于  $G_2$ , 且  $g_{1\alpha}g_{2\beta} = g_{2\beta}g_{1\alpha}$ , 则  $G$  是  $G_1$  与  $G_2$  的直积,  $G_1$  与  $G_2$  称为  $G$  的直积因子。

一个群  $G$  能表示其两个子群  $G_1$  和  $G_2$  的直积, 表明三者存在非常强的结构关系, 因此只有少部分群具有直积群的形式. 具体而言,  $G$ ,  $G_1$ , 及  $G_2$  需要具有以下关系:

1.  $G_1$  与  $G_2$  的乘法互易. 因为取  $\forall g_{1\alpha}, g_{1\alpha'} \in G_1, g_{2\beta}, g_{2\beta'} \in G_2$ , 只有当  $G_1$  和  $G_2$  间乘法互易时,  $g_{\alpha\beta}g_{\alpha'\beta'} = g_{1\alpha}g_{2\beta}g_{1\alpha'}g_{2\beta'} = g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta}g_{2\beta'} = g_{1\alpha}g_{1\alpha'}g_{2\beta'}g_{2\beta} = g_{\alpha'\beta'}$  才满足直积群的运算规则。
2.  $G_1$  与  $G_2$  仅有单位元一个公共元素, 否则  $G$  的元素  $g_{\alpha\beta}$  不能由  $G_1$  及  $G_2$  的元素唯一表示. 使用反证法, 假设  $G_1$  及  $G_2$  除了单位元还有公共元素  $g$ , 则  $g \in G$  可以表示成  $ge = eg$ , 与唯一表示矛盾。
3.  $G_1$  与  $G_2$  都是  $G$  的不变子群. 因为  $G$  的任意元素都能表示为  $g_{1\alpha'}g_{2\beta'}$ , 而对  $\forall g_{1\alpha} \in G_1$ , 其同类元素

$$(g_{1\alpha'}g_{2\beta'})g_{1\alpha}(g_{1\alpha'}g_{2\beta'})^{-1} = g_{1\alpha'}g_{2\beta'}g_{1\alpha}g_{2\beta'}^{-1}g_{1\alpha'}^{-1} = g_{1\alpha'}g_{1\alpha}g_{1\alpha'}^{-1} \in G_1,$$

即  $G_1$  为由完整类构成的子群, 所以  $G_1 \triangleleft G = G_1 \otimes G_2$ . 同理可证  $G_2 \triangleleft G$ .

第三点也意味着, 若  $G$  能表示为两个群的直积, 则  $G$  至少有两个除单位元外无公共元素的不变子群. 因此, 直积群也可以通过如下方式判断: 设  $G_1, G_2$  为群  $G$  的两个子群, 若他们满足

1.  $G_1, G_2$  为群  $G$  的两个不变子群 (等价于  $G_1$  与  $G_2$  的乘法互易)。
2.  $G_1$  与  $G_2$  仅有单位元一个公共元素。
3. 群  $G$  是所有形如  $g_{1\alpha}g_{2\beta}$  乘积所构成的集合。

则群  $G$  是群  $G_1$  与  $G_2$  的直积群。

**例 1.41.**  $xy$  平面中的矢量在矢量加法下构成群  $G_1 = \{(x, y) | x, y \in \mathbb{R}\}$ ,  $z$  轴上的矢量在此运算下也构成群  $G_2 = \{z | z \in \mathbb{R}\}$ , 则  $\mathbb{R}^3$  中矢量的加法群可以表示为  $G_1 \otimes G_2 = \{(x, y, z) | x, y, z \in \mathbb{R}\}$ 。

**例 1.42.**  $C_6 = \{e, a, a^2, a^3, a^4, a^5\} = C_2 \otimes C_3$ 。

证明.  $C_6$  是 Abel 群, 其任意子群都是不变子群, 而  $C_6$  有两个真不变子群  $C_2 = \{e, a^3\}$  和  $C_3 = \{e, a^2, a^4\}$ . 两个不变子群只有单位元  $e$  一个公共元素, 且乘法互易, 所以  $C_6 = C_2 \otimes C_3$ .  $\square$

基于此, 我们可以求出 10 阶以内的直积群  $G_1 \otimes G_2$ , 即  $m \times n \leq 10$  ( $m, n > 1, m, n \in \mathbb{Z}_+$ ), 此处  $m = |G_1|, n = |G_2|$ 。

1.  $2 \times 2 = 4$ : 2 阶群只有循环群  $C_2$ , 因此 4 阶群存在直积群  $C_2 \otimes C_2 \cong V_4(D_2)$ 。

2.  $2 \times 3 = 6$ : 2、3 阶群只有循环群, 因此 6 阶群存在直积群  $C_2 \otimes C_3 \cong C_6$ 。
3.  $2 \times 4 = 8$ : 2 阶群只有循环群  $C_2$ , 而 4 阶群有  $C_4$  和  $D_2$  两种, 因此 8 阶群存在两种直积群, 分别为  $C_2 \otimes C_4$  和  $D_2 \otimes C_2$ 。
4.  $3 \times 3 = 9$ : 9 阶群存在直积群  $C_3 \otimes C_3$ 。
5.  $2 \times 5 = 10$ : 10 阶群存在直积群  $C_2 \otimes C_5 \cong C_{10}$ 。

值得注意的是, 8 阶群里的直积群  $C_2 \otimes C_4$  和  $D_2 \otimes C_2$ , 与我们已知的 8 阶循环群  $C_8$  和二面体群  $D_4$  都不相同。考虑循环群  $C_8$ , 其存在两个真不变子群  $C_4 = \{e, a^2, a^4, a^6\}$  和  $C_2 = \{e, a^4\}$ , 然而这两个不变子群具有非单位元外的公共元素, 因此  $C_8$  并不能表示成直积群的形式。对于  $D_4$  而言, 虽然子群  $C_4 = \{e, a, a^2, a^3\}$  与  $C_2 = \{e, S_0\}$  仅有单位元作为公共元素, 但  $C_2$  并非其不变子群, 因此  $D_4$  也不具有直积群的形式。除此之外, 我们可以直接用对比群阶的方法判断。由拉格朗日定理, 8 阶群群元的阶只能为 1、2、4、8, 我们可以列出上述 8 阶群中不同阶的群元的个数, 如下表所示:

	1阶	2阶	4阶	8阶
$C_8$	1	1	2	4
$D_4$	1	5	2	0
$C_2 \otimes C_4$	1	3	4	0
$D_2 \otimes C_2$	1	7	0	0
$Q$	1	1	6	0

据此也能发现  $C_8$  和  $D_4$  与这两个直积群都不相同。这里最后一行的  $Q$  群也是一个 8 阶群, 为四元数群, 具体将会在后文介绍。

显然, 直积群具有很强的结构, 然而并非所有群都有这种结构。如  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$ , 取  $C_3 = \{e, d, f\}$  和  $C_2 = \{e, a\}$ , 二者仅有单位元一个公共元素,  $D_3$  的任意元素也能唯一表示成  $C_3$  中元素  $g_{1\alpha}$  与  $C_2$  中元素  $g_{2\beta}$  的乘积, 但二者间的乘法并不互易  $da \neq ad$ 。此时,  $D_3$  并不能表示成  $C_3$  和  $C_2$  的直积 ( $C_3 \otimes C_2 = C_6$ )。虽然如此,  $D_3$  还是能由  $C_3$  和  $C_2$  按某种关系来构造, 这实际是一种弱化的乘积概念。

**§ 定义 1.19. 半直积群** 两个群  $G_1$  与  $G_2$ ,  $G_1$  在  $G_2$  下是不变的, 即对  $\forall g_{2\beta} \in G_2$ , 有  $g_{2\beta}G_1g_{2\beta}^{-1} = G_1$ 。那么  $G_1$  与  $G_2$  各贡献一个群元  $g_{1\alpha}$  与  $g_{2\beta}$ , 在群  $G$  的乘法下形成的集合称为  $G_1$  与  $G_2$  的半直积群, 记为  $G_1 \otimes_S G_2$ , 或  $G_1 \rtimes G_2$ 。

**注 1.** 对于  $G = G_1 \rtimes G_2$  中,  $G_1$  是  $G_2$  不变的, 意味着  $G_1$  是  $G$  不变的, 即  $\forall g \in G$ , 有  $gG_1g^{-1} = G_1$ , 即  $G_1$  是  $G$  的不变子群。

**注 2.**  $G = G_1 \otimes G_2$  中,  $G_1$  与  $G_2$  都是  $G$  的不变子群, 意味着  $G_1$  与  $G_2$  的乘积一定对易。因此直积可看做一种特殊的半直积。

**例 1.43.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$ , 取  $C_3 = \{e, d, f\}$ ,  $C_2 = \{e, a\}$ , 则  $D_3 = C_3 \rtimes C_2$ 。

证明.  $C_3 \triangleleft D_3$ ,  $D_3$  中的所有元素都能写为唯一表示成  $C_3$  中元素  $g_{1\alpha}$  与  $C_2$  中元素  $g_{2\beta}$  的乘积:

$$\begin{aligned} e &= ee, & d &= de, & f &= fe, \\ a &= ea, & b &= fa, & c &= da, \end{aligned}$$

因此  $D_3 = C_3 \rtimes C_2$ 。由此可以推广为  $D_n = C_n \rtimes C_2$ 。□

基于目前的知识, 我们可以列出阶数 10 以内的有限群如下:

阶数	群
1	$C_1 = \{e\}$
2	$C_2$
3	$C_3$
4	$C_4, C_2 \otimes C_2 = V_4(D_2)$ [最小的非循环群]
5	$C_5$
6	$C_6 = C_2 \otimes C_3, D_3 = C_3 \times C_2$ [最小的非 Abel 群]
7	$C_7$
8	$C_8, D_4 = C_4 \times C_2, C_4 \otimes C_2 (C_{4h}),$ $D_2 \otimes C_2 = C_2 \otimes C_2 \otimes C_2 (D_{2h}), Q$ [四元数群]
9	$C_9, C_3 \otimes C_3$
10	$C_{10} = C_2 \otimes C_5, D_5 = C_5 \times C_2$

8 阶群中存在一个此前并未接触过的  $Q$  群, 指四元数群, 与哈密顿所提出的四元数  $a + bi + cj + dk$  有关。四元数群为  $Q = \{1, -1, i, -i, j, -j, k, -k\}$ , 乘法满足  $i^2 = j^2 = k^2 = -1, ij = -ji = k, jk = -kj = i, ki = -ik = j$ , 显然为非 Abel 群。 $Q$  群一般还有另一种采用泡利矩阵的表示  $Q = \{1, -1, i\sigma_1, -i\sigma_1, i\sigma_2, -i\sigma_2, i\sigma_3, -i\sigma_3\}$ , 满足

$$\sigma_1 = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \sigma_2 = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \sigma_3 = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (1.22)$$

乘法关系为矩阵乘法, 1 表示二阶单位矩阵。 $Q$  群与  $C_3 \otimes C_3$  群是 10 阶群里不能表示成点群的两种有限群。

## 1.6 变换群 (置换群)

变换群是以变换为群元组成的群, 它是物理研究中最常用到的一种群, 包括点群和空间群等。我们先对变换本身做以下定义。

§ 定义 1.20. 变换 (置换) 设  $X$  是一个非空集合,  $X = \{x, y, z, \dots\}$ ,  $f$  是将  $X$  映入其自身的一一映射,  $f(x) = y \in X$ , 那么我们将  $f$  称为  $X$  上的变换或置换。

在变换的基础上, 定义两个  $X$  上两个变换  $f, g$  的乘积, 则可以利用  $X$  上的变换构造群结构。

§ 定义 1.21. 完全对称群 (置换群) 定义  $X$  上的两个置换  $f, g$  的乘积为  $fg$  为先对  $X$  进行置换  $g$ , 再对  $X$  进行置换  $f$ , 即对  $\forall x \in X$ , 有  $fg(x) = f(g(x))$ , 那么  $X$  的全体置换在此乘法规则下形成一个群, 称为  $X$  上的完全对称群, 记为  $S_X$ 。若  $X$  为  $n$  个元素的集合, 则称其上的完全对称群为  $X$  上的  $n$  阶置换群, 记为  $S_n$ 。

通常  $X$  包含无限个元素, 则完全对称群  $S_X$  为无限群。一般而言, 我们不会去研究  $X$  上的完全对称群  $S_X$ , 而是研究其一个子群。

§ 定义 1.22. 变换群 完全对称群的子群称为  $X$  上的变换群或对称群。

**例 1.44.**  $C_3 < S_3$ ,  $D_3 \cong S_3$ .

显然, 对于一个  $n$  阶群  $G$ , 我们可将其群元  $g$  当成变换对象, 从而定义一个完全变换群  $S_n$ . 以下定理表明  $n$  阶群  $G$  与完全变换群  $S_n$  存在一定关系。

■ **定理 1.8. 凯莱定理** 任意  $n$  阶群  $G$  同构于  $S_n$  的一个子群。

证明. 思路是构造一个  $S_n$  的子群 (变换群), 该子群与  $G$  同构。

1. 对于  $\forall g \in G$ , 先定义对  $G$  的映射  $f_g$  为:  $\forall h \in G, f_g(h) = gh$ . 由重排定理知,  $f_g$  是将  $G$  映入自身的一一映射, 因此  $f_g$  是一个变换. 集合  $F = \{f_g | g \in G\}$  是  $S_n$  的子集。
2. 当  $g$  取遍  $G$  中所有群元时, 所有变换  $f_g$  构成的集合  $F$  构成群: (1) 封闭性:  $\forall g_i \in G, f_{g_1} f_{g_2} = f_{g_1 g_2}$ , 由  $g_1 g_2 \in G$  知  $f_{g_1 g_2} \in F$ ; (2) 单位元: 取  $g = e$  为  $G$  的单位元, 则  $f_e$  为恒等变换; (3) 结合律:  $\forall g_i \in G$ , 有  $(f_{g_1} f_{g_2}) f_{g_3} = f_{g_1} (f_{g_2} f_{g_3})$ ; (4) 逆元素: 对于  $\forall g \in G$  和  $f_g$ , 存在唯一  $g^{-1} \in G$  和  $f_{g^{-1}}$ , 使得  $f_g f_{g^{-1}} = f_{g^{-1}} f_g = f_e$ . 因此  $F$  构成一个变换群, 是完全变换群  $S_n$  的子群。
3.  $F$  与  $G$  存在一一映射关系:  $\phi: g \rightarrow f_g$ , 且

$$(f_{g_1} f_{g_2})(h) = f_{g_1}(f_{g_2}(h)) = f_{g_1}(g_2 h) = g_1(g_2 h) = g_1 g_2 h = f_{g_1 g_2}(h) \quad (1.23)$$

即该映射保持乘法关系不变, 因此是同构映射. 综上所述可知  $F \cong G$ .

□

变换群  $S_X$  表示将集合  $X$  映成自身的一一映射的集合, 若集合  $X$  有无数个元素, 此时  $S_X$  为无限群. 如果集合  $X$  只包含有限的  $n$  个元素, 我们可以用置换的方法描写这种一一映射。

§ **定义 1.23. 置换** 将  $n$  个数字  $\{1, 2, \dots, n\}$  的排列  $a_1, a_2, \dots, a_n$  映为  $b_1, b_2, \dots, b_n$  的操作, 称为一个  $n$  阶置换, 记为  $s$ ,  $s$  的形式为

$$s = \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ b_1 & b_2 & \cdots & b_n \end{pmatrix}.$$

注. 以上记法与列的顺序无关, 只与上下两行的配对有关, 即

$$\begin{pmatrix} \cdots & a_i & \cdots & a_j & \cdots \\ \cdots & b_i & \cdots & b_j & \cdots \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cdots & a_j & \cdots & a_i & \cdots \\ \cdots & b_j & \cdots & b_i & \cdots \end{pmatrix}.$$

在物理学中, 置换粒子的操作是使全同粒子体系保持不变的操作, 因此在量子统计中广泛应用. 引入置换的乘积, 则可进一步定义置换群。

§ **定义 1.24. 置换群** 若定义两个置换  $r, s$  的乘积  $rs$  为先执行置换  $s$ , 再执行置换  $r$ , 则在此乘法规则下, 所有的  $n$  阶置换的集合构成一个群, 称为  $n$  阶置换群或  $n$  阶对称群, 记为  $S_n$ 。

此处定义的  $n$  阶置换群与上一节定义的  $n$  阶变换群是一致的. 置换操作的集合构成群的证明, 见例 1.6. 显然,  $n$  阶置换群的群阶为  $|S_n| = n!$ . 伽罗瓦理论是建立在置换群的基础上的。

**例 1.45.**  $S_2 \cong C_2$ ,  $S_3 \cong D_3$  ( $S_3$  为 6 阶非 Abel 群)。

下面, 我们再定义一种特殊的置换。

**§ 定义 1.25. 轮换** 一种特殊的置换  $\begin{pmatrix} e_1 & e_2 & \cdots & e_n \\ e_2 & e_3 & \cdots & e_1 \end{pmatrix}$  称为轮换, 记为  $(e_1, e_2, \cdots, e_n)$ , 轮换数码的个数  $n$  称为轮换的阶。

**注.** 轮换中的数码不能随意对调, 即  $(e_1, e_2, \cdots, e_n) \neq (e_2, e_1, \cdots, e_n)$ , 但可以做轮换  $(e_1, e_2, \cdots, e_{n-1}, e_n) = (e_2, e_3, \cdots, e_n, e_1)$ 。

而 2 阶轮换则是最简单的置换。

**§ 定义 1.26. 对换** 2 阶轮换称为对换。

有了轮换和对换的定义, 我们可以简化置换群的研究, 这表现为以下三点。

1. 任一  $n$  阶置换可以分解成相互独立的轮换的乘积, 如

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 & 6 \\ 4 & 2 & 6 & 5 & 1 & 3 \end{pmatrix} = (1, 4, 5)(2)(3, 6) = (1, 4, 5)(3, 6). \quad (1.24)$$

2. 如两个轮换无公共数码, 则两个轮换相互独立, 并可交换。

3. 任一轮换可写成若干对换的乘积, 即

$$(a_1, a_2, \cdots, a_n) = (a_1, a_n)(a_1, a_{n-1}) \cdots (a_1, a_3)(a_1, a_2). \quad (1.25)$$

可以验证

$$\begin{aligned} (a_1, a_2, \cdots, a_n) &= \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_1 \end{pmatrix} & (1.26) \\ &= \begin{pmatrix} a_2 & a_3 & \cdots & a_1 & a_n \\ a_2 & a_3 & \cdots & a_n & a_1 \end{pmatrix} \cdots \begin{pmatrix} a_2 & a_1 & a_3 & \cdots & a_n \\ a_2 & a_3 & a_1 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_1 & a_2 & \cdots & a_n \\ a_2 & a_1 & \cdots & a_n \end{pmatrix} \\ &= (a_1, a_n)(a_1, a_{n-1}) \cdots (a_1, a_3)(a_1, a_2). \end{aligned}$$

显然这种分拆方式并不唯一,  $(a_1, a_2, \cdots, a_n) = (a_1, a_2)(a_2, a_3) \cdots (a_{n-2}, a_{n-1})(a_{n-1}, a_n)$ 。

4. 又因为任意置换都能写成轮换的乘积, 因此任意置换都能写成若干对换的乘积。

5. 虽然将置换分拆成对换乘积的方式不唯一, 但是这种乘积的奇偶性是不变的, 即一个置换分解成的奇数个或偶数个对换的乘积。由此我们可以定义奇置换和偶置换, 显然恒等置换为偶置换。

$n$  阶置换群  $S_n$  中的所有偶置换, 实际也构成一个群。

**§ 定义 1.27. 交错群**  $n$  阶置换群中所有偶置换构成的子群称为  $n$  阶交错群, 记为  $A_n$ 。

证明. 我们将证明所有偶置换不仅构成  $S_n$  的子群, 而且还是不变子群。

先证明所有偶置换构成一个群, 结合律是显然的, 只需证明其他三点。(1) 封闭性: 两个偶置换的乘积同样是偶置换。(2) 单位元: 恒等置换  $e$  显然为偶置换。(3) 逆元素: 对于任意偶置换  $g$ , 因为恒等置换  $e$  为偶置换, 其逆置换  $g^{-1}$  同样是偶置换。因此所有偶置换构成  $S_n$  的子群, 即交错群  $A_n$ 。

再证明交错群  $A_n$  是置换群  $S_n$  的不变子群。取任一偶置换  $h \in A_n$ , 对于  $S_n$  中的任意置换  $g$ ,  $h$  的同类元素  $ghg^{-1}$  都为偶置换, 即  $h$  的所有同类元素都属于  $A_n$ , 所以  $A_n$  为  $S_n$  的不变子群, 陪集为奇置换的集合。当  $n \geq 3$  时,  $S_n/A_n \cong C_2$ 。□

在代数领域, 变换群或者置换群的一个重要应用, 便是解决一元五次方程无根式解的问题, 即伽罗瓦理论。

变换群表述的是变换操作的集合, 并没有关注变换的对象。对变换对象最重要的概念是等价性。

§ 定义 1.28. 等价性 设  $G$  为  $X$  上的变换群, 若对  $x, y \in X$ , 存在  $g \in G$ , 使得  $g(x) = y$ , 则称  $x$  与  $y$  等价, 记为  $x \sim y$ 。

等价元素具有以下两个性质。

1. 相互性: 若  $x \sim y$ , 则  $y \sim x$ 。因为若存在  $g \in G$  使得  $g(x) = y$ , 则有  $g^{-1} \in G$  使得  $g^{-1}(y) = x$ , 即  $y \sim x$ 。
2. 传递性: 若  $x \sim y$ ,  $y \sim z$ , 则  $x \sim z$ 。因为若存在  $g, h \in G$  使得  $g(x) = y$  和  $h(y) = z$ , 则  $hg(x) = h(g(x)) = z$ , 即  $x \sim z$ 。

基于等价概念, 我们可以定义轨道概念, 即由等价元素构成的集合, 这类似于类的概念。

§ 定义 1.29.  $x$  的  $G$  轨道 设  $G$  为  $X$  上的变换群,  $x$  为  $X$  中元素, 由  $X$  中所有与  $x$  等价的元素的集合, 称为  $x$  的  $G$  轨道。

例 1.46.  $\mathbb{R}^2$  上的矢量  $\mathbf{r} = x\mathbf{i} + y\mathbf{j}$  关于定轴旋转群  $G = \{C_k(\theta) \mid \theta \in [0, 2\pi)\}$  的轨道。

对于  $\forall g \in G$ , 有

$$\begin{aligned} g(\mathbf{r}) &= C_k(\theta)(x\mathbf{i} + y\mathbf{j}) \\ &= (x \cos \theta - y \sin \theta)\mathbf{i} + (x \sin \theta + y \cos \theta)\mathbf{j} \\ &= x'\mathbf{i} + y'\mathbf{j}, \end{aligned} \tag{1.27}$$

而  $|\mathbf{r}| = |\mathbf{r}'| = \sqrt{x^2 + y^2}$ , 因此  $\mathbf{r}$  的  $G$  轨道为以原点为圆心、半径为  $|\mathbf{r}|$  的圆周。

例 1.47. 圆周上的点的变换群可以记成  $D_\infty$  (二面体群  $D_N$ , 取  $N \rightarrow \infty$ )。考虑圆周的內接正四边形, 四个顶点构成点集  $X = \{A, B, C, D\}$ , 如图 1.13 所示。二面体群  $D_4 < D_\infty$  为  $X$  的变换群,  $A$  点的  $D_4$  轨道构成四个顶点  $X$ 。

从  $A$  点出发,  $D_4 = \{e, R, R^2, R^3, S_0, S_1, S_2, S_3\}$  中不同的变换会让  $A$  点变换到不同的等价点, 即

$$\begin{aligned} \{e, S_3\} &: A \rightarrow A \\ \{R, S_0\} &: A \rightarrow B \\ \{R^2, S_1\} &: A \rightarrow C \\ \{R^3, S_2\} &: A \rightarrow D \end{aligned}$$

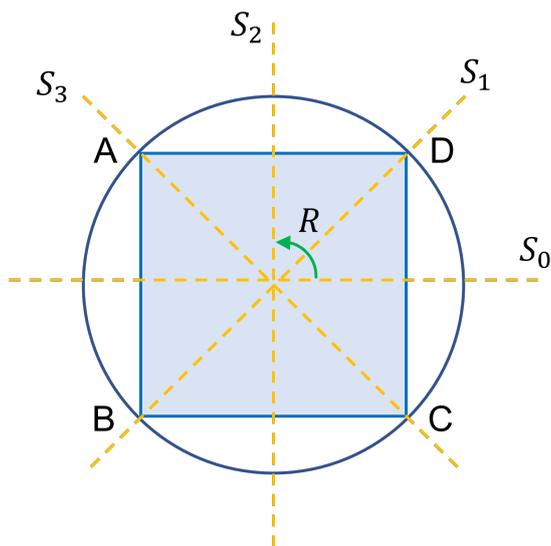


图 1.13:  $D_4$  为正四边形顶点  $\{A, B, C, D\}$  的变换群。

留意到所有保持  $A$  点不变的操作  $\{e, S_3\}$  构成变换群  $D_4$  的一个子群, 另外的操作构成的集合则是该子群的陪集  $\{R, S_0\} = R\{e, S_3\}, \dots$ 。因此, 对于集合  $X$  中的每一个元素, 都能定义变换群  $G$  的一个子群。

**§ 定义 1.30. 小群 (迷向子群)** 设  $G$  是  $X$  上的变换群,  $x$  是  $X$  中一点,  $G$  的子群  $G^x$  保持  $x$  不变, 也就是  $G^x = \{h | h \in G \text{ 且 } h(x) = x\}$ , 则称  $G^x$  是  $G$  对  $x$  的小群, 或迷向子群。

证明. 容易证明变换群  $G$  中保持  $x$  不变的变换构成群, 因为  $G$  中已满足结合律, 只需证明其余三点即可。

1. 封闭性: 若  $g_1, g_2 \in G^x$ , 满足  $g_1(x) = g_2(x) = x$ , 则  $g_1g_2(x) = g_1(g_2(x)) = x$ , 即  $g_1g_2 \in G^x$ 。
2. 单位元:  $e(x) = x$ , 即  $e \in G^x$ 。
3. 逆元素: 对于  $\forall g \in G^x, g(x) = x$ , 则  $x = g^{-1}(x)$ , 所以  $g^{-1} \in G^x$ 。

□

小群及其陪集分割带来以下定理。

**■ 定理 1.9.** 设  $G^x$  是  $G$  对  $x$  的小群, 则  $G^x$  的每个左陪集把  $x$  映为  $G$  中一个特定的点  $y$ , 且不同陪集把它映为不同的点。也就是说含  $x$  的  $G$  轨道上的点, 与  $G^x$  的左陪集一一对应。

证明. 先证明同一陪集  $gG^x$  把  $x$  变换为同一个点  $y$ 。取  $\forall h \in G^x$ , 由小群的定义有  $h(x) = x$ , 而对于左陪集  $gG^x$  的任意元素  $gh$ , 都有  $gh(x) = g(x) = y$ 。

再证明不同陪集  $g_1G^x$  和  $g_2G^x$  把  $x$  变换为不同的点  $y_1$  和  $y_2$ 。使用反证法,  $g_1G^x \neq g_2G^x$ , 假设存在  $h_1, h_2 \in G^x$ , 使得  $g_1h_1(x) = g_2h_2(x) = y$ , 则  $g_2^{-1}g_1h_1(x) = h_2(x) = x$ , 所以  $g_2^{-1}g_1h_1 \in G^x$ , 即  $g_2^{-1}g_1 \in G^x$ , 因而  $g_1 \in g_2G^x$ 。由陪集定理知  $g_1G^x$  和  $g_2G^x$  完全相同, 与  $g_1G^x \neq g_2G^x$  矛盾。因此不同的陪集把  $x$  变换为不同的点  $y_1$  和  $y_2$ 。

□

结合拉格朗日定理, 可以得到以下推论。

**推论.** 当群  $G$  的阶为  $n$ , 其迷向子群  $G^x$  的阶为  $m$  时, 含  $x$  的  $G$  轨道点的个数为  $n/m$ 。

变换群及小群的概念在描述晶体对称性的点群和空间群中有重要的应用, 这些内容将在后文介绍。

## 2 群的表示理论

### 2.1 群表示

在第 1 章中, 我们主要接触抽象群, 即关注抽象元素之间的群结构关系, 这样的关系一般难以计算。在物理应用中, 我们通常需要借助切实可行的计算理解和分析元素间的关系及群的结构, 因此群的表示理论是物理学中更为常用的, 而其中有限群的表示理论则是凝聚态物理中最为广泛使用的。群表示理论, 实际为寻找与抽象群 (特别是有限群) 同态的矩阵群, 利用矩阵容易计算的特点研究群的结构。为此, 读者需要熟悉以下线性代数的相关知识:

- 线性空间, 线性相关与线性无关, 维度, 基;
- 线性变换, 相似变换;
- 子空间, 不变子空间, 补空间;
- 内积空间, 酉变换;
- 矩阵, 行列式, 迹, 秩。

我们先回顾上述概念。

**§ 定义 2.1. 线性空间** 线性空间又叫向量空间, 它是定义在数域  $K$  上的向量集合  $V = \{\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z}, \dots\}$ , 在  $V$  中可以定义加法和数乘两种运算。设  $\mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in V$ ,  $a, b, c \in K$ , 向量加法和数乘具有封闭性, 且对加法满足:

1.  $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \mathbf{y} + \mathbf{x}$ ;
2.  $(\mathbf{x} + \mathbf{y}) + \mathbf{z} = \mathbf{x} + (\mathbf{y} + \mathbf{z})$ ;
3. 有唯一  $\mathbf{0}$  元素, 对  $\mathbf{x} \in V$ ,  $\mathbf{0} + \mathbf{x} = \mathbf{x} + \mathbf{0}$ ;
4. 对  $\mathbf{x} \in V$ , 有唯一  $(-\mathbf{x})$ , 使得  $\mathbf{x} + (-\mathbf{x}) = \mathbf{0}$ 。

对数乘满足:

1.  $1\mathbf{x} = \mathbf{x}$
2.  $(ab)\mathbf{x} = a(b\mathbf{x})$
3.  $a(\mathbf{x} + \mathbf{y}) = a\mathbf{x} + a\mathbf{y}$
4.  $(a + b)\mathbf{x} = a\mathbf{x} + b\mathbf{x}$

**注.** 向量空间  $V$  中的加法和数乘 ( $\dot{+}$ ) 与数域  $K$  中的加法和乘法 ( $+$ ,  $\times$ ) 不一定相同。

**例 2.1.** 最高次项不高于  $n$  的全体多项式  $a_0x^n + a_1x^{n-1} + \dots + a_n$  构成线性空间。

**例 2.2.** 取数域  $K = \mathbb{R}$  ( $K$  中的加法和乘法为普通的  $+$  和  $\times$ ),  $V = \mathbb{R}^+ = \{x | x > 0\}$ , 取  $V$  中的加法为  $x \dot{+} y = xy$ , 数乘为  $t \dot{\times} x = x^t$ , 构成一个线性空间。容易验证  $a \dot{\times} (x \dot{+} y) = (xy)^a = x^a y^a = a \dot{\times} x \dot{+} a \dot{\times} y$ ,  $(a + b) \dot{\times} x = x^{a+b} = x^a x^b = a \dot{\times} x \dot{+} b \dot{\times} x$ 。

§ **定义 2.2. 线性无关** 线性空间  $V$  中, 任意  $n$  个向量  $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n$  的线性组合  $a_1\mathbf{X}_1 + a_2\mathbf{X}_2 + \dots + a_n\mathbf{X}_n = 0$  当且仅当  $a_1 = a_2 = \dots = a_n = 0$  时成立, 其中这些系数都是线性空间数域  $K$  上的数, 这时, 称  $\mathbf{X}_1, \mathbf{X}_2, \dots, \mathbf{X}_n$  这些向量线性无关。否则, 它们线性相关。

§ **定义 2.3. 线性空间的维数** 线性空间中线性无关的向量的最大个数  $m$ , 称为线性空间的维数, 记为  $\dim(V) = m$ 。

§ **定义 2.4. 基矢** 设  $V$  是  $n$  维线性空间, 则  $V$  中任意一组  $n$  个线性无关的向量, 都可以构成  $V$  的基矢, 记为  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$ 。空间中任意矢量都可以表示成为这  $n$  个基矢的线性组合,  $\mathbf{X} = \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{e}_i$ 。

有了基矢后,  $V$  中的任意矢量  $\mathbf{X} = \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{e}_i$  仅由对应基矢的展开系数确定, 即可将  $\mathbf{X}$  写为

$$\mathbf{X} = \left( \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \right) [\mathbf{X}], \quad [\mathbf{X}] = \begin{pmatrix} x_1 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad (2.1)$$

其中  $[\mathbf{X}]$  称为在基矢  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$  下的坐标。由此也可将基矢的坐标写为

$$[\mathbf{e}_1] = \begin{pmatrix} 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad [\mathbf{e}_i] = \begin{pmatrix} 0 \\ \vdots \\ 1 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix} \text{ (第 } i \text{ 行)}. \quad (2.2)$$

§ **定义 2.5. 线性变换** 线性变换  $A$  是将线性空间  $V$  映入  $V$  的映射, 满足  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in V, a, b \in K, A: V \rightarrow V, A(\mathbf{x}) \in V, A(a\mathbf{x} + b\mathbf{y}) = aA(\mathbf{x}) + bA(\mathbf{y})$ , 也就是说这个变换作用到向量的线性组合上, 等于这个变换作用到向量上的线性组合。这样的变换称为线性变换。

若线性变换  $A$  把矢量  $\mathbf{x}$  映射为  $\mathbf{y}$ , 即  $A(\mathbf{x}) = \mathbf{y}$ , 我们想知道  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{y}$  的坐标是怎么通过线性变换联系的。考虑矢量在基矢  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$  中的展开  $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x_i \mathbf{e}_i$  和  $\mathbf{y} = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{e}_i$ , 则

$$\mathbf{y} = A(\mathbf{x}) = A\left(\sum_{j=1}^n x_j \mathbf{e}_j\right) = \sum_{j=1}^n x_j A(\mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^n y_i \mathbf{e}_i. \quad (2.3)$$

若线性变换  $A$  将基矢变换为

$$A(\mathbf{e}_j) = \sum_{i=1}^n a_{ij} \mathbf{e}_i = \left( \mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n \right) \begin{pmatrix} a_{1j} \\ a_{2j} \\ \vdots \\ a_{nj} \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

则

$$\sum_{j=1}^n x_j A(\mathbf{e}_j) = \sum_{i,j=1}^n x_j a_{ij} \mathbf{e}_i = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}. \quad (2.5)$$

因此得到

$$\begin{pmatrix} y_1 \\ y_2 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2n} \\ \vdots & \vdots & & \vdots \\ a_{n1} & a_{n2} & \cdots & a_{nn} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_n \end{pmatrix}, \quad [\mathbf{y}] = [A][\mathbf{x}], \quad (2.6)$$

可见矩阵  $[A]$  是在固定基矢下描述线性变换的一种方式, 即线性变换在线性空间的一个表示。

因为矩阵  $[A]$  的具体数值依赖于基矢的选取, 同一个线性变换  $A$  在不同基矢下的表示一般不相同。现在我们考虑同一个线性变换  $A$  在两组不同基矢下矩阵间的关系。假设在旧基矢  $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)$  下, 矢量  $\mathbf{x}$ ,  $\mathbf{y}$  及线性变换  $A$  的表示为

$$[\mathbf{y}] = [A][\mathbf{x}], \quad (2.7)$$

而在新基矢  $(\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n)$  下的表示为

$$[\mathbf{y}]' = [A]'[\mathbf{x}]'. \quad (2.8)$$

而新基与旧基的关系为

$$\mathbf{e}'_j = \sum_{i=1}^n P_{ij} \mathbf{e}_i = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) \begin{pmatrix} P_{1j} \\ \vdots \\ P_{nj} \end{pmatrix}, \quad (\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n) = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [P], \quad (2.9)$$

$[P]$  表示新基在旧基下的展开矩阵。由于

$$\mathbf{x} = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [\mathbf{x}] = (\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n) [\mathbf{x}]' = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [P][\mathbf{x}]', \quad (2.10)$$

可知

$$[\mathbf{x}] = [P][\mathbf{x}]', \quad (2.11)$$

同理有  $[\mathbf{y}] = [P][\mathbf{y}]'$ 。结合  $[\mathbf{y}] = [A][\mathbf{x}]$  有

$$[P][\mathbf{y}]' = [A][P][\mathbf{x}]' \Rightarrow [\mathbf{y}]' = [P^{-1}][A][P][\mathbf{x}]'. \quad (2.12)$$

最后对比新基下的变换式, 得到

$$[A]' = [P^{-1}][A][P], \quad (2.13)$$

此即同一个线性变换  $A$  在不同的基矢下表示矩阵的联系。相反, 如果两个矩阵能通过以上关系联系, 则它们描述的变换其实具有一定的相似性。

**§ 定义 2.6. 相似变换** 设  $A$  和  $B$  都是  $n$  阶矩阵, 若有可逆矩阵  $P$ , 使得  $P^{-1}AP = B$ , 则称  $B$  是  $A$  的相似矩阵,  $P^{-1}AP$  代表的线性变换称为  $A$  的相似变换。

进一步, 我们考虑所有可逆的线性变换组成的集合, 在定义了合适的乘法后, 这个集合将具有群的结构。

§ 定义 2.7. **线性变换群** 定义两个线性变换的乘法为两个线性变换相继作用, 则  $n$  维复线性空间  $V$  上的全部非奇异线性变换在此乘法下构成一个群, 称为  $n$  维复一般线性群  $GL(V, \mathbb{C})$ , 其子群  $L(V, \mathbb{C})$  称为  $V$  上的线性变换群。

注 1. 除了有  $n$  维复一般线性群  $GL(V, \mathbb{C})$  外, 还有由所有  $n$  阶可逆复方阵组成的群  $GL(n, \mathbb{C})$ 。由于线性变换与矩阵的内涵是一致的, 我们并不区分此二者。

注 2. 一般我们不关心  $GL(V, \mathbb{C})$  本身, 而是关心其具有某些特殊性质的子群  $L(V, \mathbb{C})$ , 如只取满足  $\det(A) = \pm 1$  或  $\det(A) = 1$  的线性变换 (矩阵) 组成的子群。

有了线性变换群  $L(V, \mathbb{C})$ , 我们便可构造从抽象群  $G$  到  $L(V, \mathbb{C})$  的同态或同构映射。

§ 定义 2.8. **群表示** 设有群  $G$ , 如存在一个从  $G$  到  $n$  维线性空间  $V$  上的线性变换群  $L(V, \mathbb{C})$  的同态映射  $A$ , 则称  $A$  是群  $G$  的一个线性表示,  $V$  为表示空间,  $n$  是表示的维数。记为:  $A: G \rightarrow V$ ,

$$\forall g \in G, \text{ 有 } A(g) \in L,$$

$$\forall g_\alpha, g_\beta \in G, \text{ 有 } A(g_\alpha) A(g_\beta) = A(g_\alpha g_\beta).$$

注. 若此同态映射进一步为同构映射, 则称该表示为忠实表示。或者表示为  $\forall g_\alpha, g_\beta \in G, g_\alpha \neq g_\beta \Leftrightarrow A(g_\alpha) \neq A(g_\beta)$ 。

例 2.3. 任一群  $G$  都与  $n$  维单位矩阵  $I_n$  同态, 此称为  $n$  维恒等表示, 最常见的是 1 维恒等表示。

例 2.4. 任一矩阵群都是自身的忠实表示。

例 2.5. 以  $\mathbb{R}^3(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  为表示空间, 三个同构的 2 阶群: 平面反射群  $\{E, \sigma_z\}$ ,  $C_2$  群  $\{E, C_z(\pi)\}$  和空间反演群  $\{E, I\}$ , 有不同的矩阵表示。

将不同的变换操作作用到基矢  $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$  上便可得到相应的表示矩阵。

1.  $\{E, \sigma_z\}$ : 两个群元对基矢的作用为

$$E(\mathbf{i}) = 1\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 0\mathbf{k} = \begin{pmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$E(\mathbf{j}) = 0\mathbf{i} + 1\mathbf{j} + 0\mathbf{k} = \begin{pmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$E(\mathbf{k}) = 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 1\mathbf{k} = \begin{pmatrix} \mathbf{i} & \mathbf{j} & \mathbf{k} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$\begin{aligned}\sigma_z(\mathbf{i}) &= 1\mathbf{i} + 0\mathbf{j} + 0\mathbf{k} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_z(\mathbf{j}) &= 0\mathbf{i} + 1\mathbf{j} + 0\mathbf{k} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \\ \sigma_z(\mathbf{k}) &= 0\mathbf{i} + 0\mathbf{j} - 1\mathbf{k} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ -1 \end{pmatrix},\end{aligned}$$

因此两个群元的表示矩阵分别为

$$A(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(\sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.14)$$

以上结果也可以通过关系  $E: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ ,  $\sigma_z: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (\mathbf{i}, \mathbf{j}, -\mathbf{k})$  直接得到。

2.  $\{E, C_z(\pi)\}$ : 同理, 通过关系  $E: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ ,  $C_z(\pi): (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (-\mathbf{i}, -\mathbf{j}, \mathbf{k})$ , 得到表示矩阵为

$$A(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(C_z(\pi)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

3.  $\{E, I\}$ : 同理, 通过关系  $E: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$ ,  $I: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (-\mathbf{i}, -\mathbf{j}, -\mathbf{k})$ , 得到表示矩阵为

$$A(E) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(I) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (2.16)$$

显然, 2 阶群都同构于循环群  $C_2$ , 因此以上结果表明即便在同一个表示空间下, 同一个群仍可存在多个群表示, 但实际上一个群只有很少的基本表示。

**例 2.6.** 定轴旋转群  $SO(2) = \{C_{\mathbf{k}}(\varphi)\}$  在  $\mathbb{R}^3(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  中的表示。

群元对基矢量的变换为

$$\begin{aligned}C_{\mathbf{k}}(\varphi)\mathbf{i} &= \cos\varphi\mathbf{i} + \sin\varphi\mathbf{j}, \\ C_{\mathbf{k}}(\varphi)\mathbf{j} &= -\sin\varphi\mathbf{i} + \cos\varphi\mathbf{j}, \\ C_{\mathbf{k}}(\varphi)\mathbf{k} &= \mathbf{k},\end{aligned}$$

所以表示矩阵为

$$A(C_{\mathbf{k}}(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos\varphi & -\sin\varphi & 0 \\ \sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.17)$$

**例 2.7.**  $D_3 = (e, d, f, a, b, c)$  的不同表示。

1. 1 维恒等表示:

$$A(e) = A(d) = A(f) = A(a) = A(b) = A(c) = 1. \quad (2.18)$$

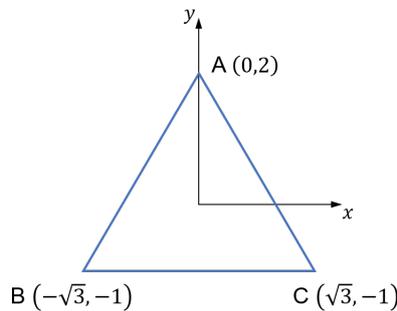
2. 因为  $D_3 \sim C_2$ , 因此  $C_2$  的表示也是  $D_3$  的表示。考虑  $C_2 = \{E, C_z(\pi)\}$  的 1 维非恒等表示:

$$A(E) = 1, A(C_z(\pi)) = -1, \quad (2.19)$$

显然该表示保持  $C_2$  的群结构。因此将  $D_3$  同态于  $C_2$  的同态核  $\{e, d, f\}$  映射为 1, 将陪集  $\{a, b, c\}$  映射为  $-1$ , 即得到  $D_3$  的 1 维非恒等表示:

$$A(e) = A(d) = A(f) = 1, A(a) = A(b) = A(c) = -1. \quad (2.20)$$

3. 在  $\mathbb{R}^3$  中的表示: 如下图建立坐标系, 以  $d$  为例, 有  $d: (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow \left(-\frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} - \frac{1}{2}\mathbf{j}, \mathbf{k}\right)$ , 可以得到六个 3 阶表示矩阵



$$A(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, A(d) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, A(f) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.21)$$

$$A(a) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, A(b) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, A(c) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

由于这是一个同构映射, 此表示也是一个忠实表示。而且, 以上矩阵都具有分块矩阵的形式。

### 对函数的变换

我们经常会使用由函数组成的线性空间作为表示空间, 即基矢为函数组  $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$ 。群元操作  $g_\alpha \in G$  是直接作用在空间变量  $\mathbf{r}$  上的, 因此我们需要找到群元  $g_\alpha$  在函数空间的表示。考虑  $g_\alpha$  的表示矩阵  $A(g_\alpha)$  将函数  $\psi_i(\mathbf{r})$  变为  $\psi'_i(\mathbf{r})$ :

$$A(g_\alpha) \psi_i(\mathbf{r}) = \psi'_i(\mathbf{r}), \quad (2.22)$$

$\psi'_i(\mathbf{r})$  表示以  $\mathbf{r}$  为变量的新函数。注意到同时变换函数和空间变量, 函数关系并不会变化, 如图2.1所示, 即

$$\psi'_i(\mathbf{r}') = \psi_i(\mathbf{r}), \mathbf{r}' = g_\alpha \mathbf{r}. \quad (2.23)$$

因此有  $\psi'_i(\mathbf{r}) = \psi_i(g_\alpha^{-1}\mathbf{r})$ , 即

$$A(g_\alpha) \psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(g_\alpha^{-1}\mathbf{r}). \quad (2.24)$$

将  $\psi_i(g_\alpha^{-1}\mathbf{r})$  展开为  $\psi_i(\mathbf{r})$  的线性叠加, 即得到函数空间下的表示矩阵。

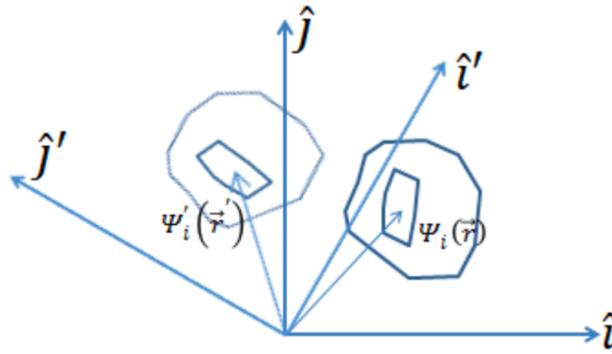


图 2.1: 函数的变换关系。

**例 2.8.**  $D_3$  群在二次齐次函数空间  $\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$  的表示。

记  $\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\} = \{\psi_1(\mathbf{r}), \dots, \psi_6(\mathbf{r})\}$ 。以  $d$  为例, 其作用在  $\psi_i(\mathbf{r})$  上为  $A(d)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(d^{-1}\mathbf{r}) = \psi_i(f\mathbf{r})$ 。由上一例已知  $d : (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (-\frac{1}{2}\mathbf{i} + \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} - \frac{1}{2}\mathbf{j}, \mathbf{k})$ ,  $f : (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \rightarrow (-\frac{1}{2}\mathbf{i} - \frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{j}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\mathbf{i} + \frac{1}{2}\mathbf{j}, \mathbf{k})$ , 即

$$\begin{aligned}
 f\mathbf{r} &= f(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\
 &= (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\
 &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} \\
 &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \\ z \end{pmatrix}.
 \end{aligned} \tag{2.25}$$

因此对  $\psi_1$ , 有

$$\begin{aligned}
 \psi_1(f\mathbf{r}) &= (f\mathbf{r})_1^2 \\
 &= \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2 \\
 &= \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}xy \\
 &= \frac{1}{4}\psi_1(\mathbf{r}) + \frac{3}{4}\psi_2(\mathbf{r}) - \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_4(\mathbf{r}),
 \end{aligned} \tag{2.26}$$

所以  $A(d)$  第一列的系数为  $\left\{\frac{1}{4}, \frac{3}{4}, 0, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, 0\right\}$ 。同理, 对其他基函数, 有

$$\begin{aligned}\psi_2(f\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right)^2 = \frac{3}{4}\psi_1(\mathbf{r}) + \frac{1}{4}\psi_2(\mathbf{r}) + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_4(\mathbf{r}), \\ \psi_3(f\mathbf{r}) &= z^2 = \psi_3(\mathbf{r}), \\ \psi_4(f\mathbf{r}) &= \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right)\left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right) = \frac{\sqrt{3}}{4}\psi_1(\mathbf{r}) - \frac{\sqrt{3}}{4}\psi_2(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}\psi_4(\mathbf{r}), \\ \psi_5(f\mathbf{r}) &= \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right)z = -\frac{1}{2}\psi_5(\mathbf{r}) + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_6(\mathbf{r}), \\ \psi_6(f\mathbf{r}) &= \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right)z = -\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_5(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}\psi_6(\mathbf{r}).\end{aligned}\tag{2.27}$$

综上, 得到  $A(d)$  矩阵为

$$A(d) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & 0 & \sqrt{3}/4 & 0 & 0 \\ 3/4 & 1/4 & 0 & -\sqrt{3}/4 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & 0 & -1/2 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1/2 & -\sqrt{3}/2 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}.\tag{2.28}$$

同理可得到其他群元的表示矩阵。

在此, 我们小结一下群表示的主要内容。

- 群表示指的是抽象群  $G$  与线性变换群的同态映射关系。
- 在求群表示矩阵的时候, 我们要做的就是每个基矢进行变换, 然后按旧基展开, 展开系数为表示矩阵的列。
- 当表示空间的基为函数, 而抽象群群元为其变量的变换时, 函数变换满足的规律是:  $A(g_\alpha)\psi_i(\mathbf{r}) = \psi_i(g_\alpha^{-1}\mathbf{r})$ 。

## 2.2 等价表示, 不可约表示, 酉表示

在之前  $D_3$  群的例子中, 实际上, 用 6 维空间的子集  $\{x^2, y^2, xy\}$  作为线性空间, 也能得到群表示

$$A'(d) = \begin{pmatrix} 1/4 & 3/4 & \sqrt{3}/4 \\ 3/4 & 1/4 & -\sqrt{3}/4 \\ -\sqrt{3}/2 & \sqrt{3}/2 & -1/2 \end{pmatrix}.\tag{2.29}$$

显然, 我们可以取其他函数空间作为表示空间, 如取  $\{x, y, z\}$  张成的线性空间为  $D_3$  的表示空间, 此时的表示矩阵为

$$A''(d) = \begin{pmatrix} -1/2 & -\sqrt{3}/2 & 0 \\ \sqrt{3}/2 & -1/2 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}.\tag{2.30}$$

虽然这两个矩阵是在不同的表示空间中得到的, 但是实际两个矩阵可通过一个相似变换联系起来

$$P^{-1}A'(d)P = A''(d), \quad (2.31)$$

更重要的是, 以上的相似变换对于所有群元对应的表示矩阵都是成立的。因此, 我们将这些由相似变换关联其来的群表示称为等价表示。

**§ 定义 2.9. 等价表示** 设群  $G = \{g_\alpha\}$  在表示空间  $V$  上的一个表示  $A$  是  $\{A(g_\alpha)\}$ , 也就是说对每个  $g_\alpha$  有个非奇异变换与之对应, 在一组基  $(\mathbf{e}_1, \mathbf{e}_2, \dots, \mathbf{e}_n)$  下,  $A(g_\alpha)$  为  $g_\alpha$  对应的非奇异矩阵。设  $P$  是  $V$  上的一个非奇异矩阵, 则相似矩阵集合  $\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$  也给出群  $G$  的一个表示, 这个表示  $\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$  称为  $\{A(g_\alpha)\}$  的等价表示。

**注 1.** 等价表示保持乘法规律不变。

因为  $\forall g_\alpha, g_\beta \in G, P^{-1}A(g_\alpha g_\beta)P = P^{-1}A(g_\alpha)A(g_\beta)P = P^{-1}A(g_\alpha)PP^{-1}A(g_\beta)P$ 。

**注 2.** 两个等价表示的表示空间维数必须相同 (表示空间本身可以不同)。

**注 3.** 判断两个表示是否等价, 原则上是要找到不依赖于  $g_\alpha$  的非奇异矩阵  $P$ 。

**注 4.** 表示  $\{A(g_\alpha)\}$  与  $\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$  的基函数的关系为  $(\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n) = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n)P$ ,  $(\mathbf{e}'_1, \dots, \mathbf{e}'_n)$  为  $\{P^{-1}A(g_\alpha)P\}$  表示的基函数。

我们可以看到, 群表示和线性代数具有以下对应关系:

$$\begin{array}{ccc} \text{线性空间} & \xrightarrow{\text{线性变换}} & \text{矩阵} \\ \updownarrow & & \updownarrow \\ \text{表示空间} & \xrightarrow{\text{群元}} & \text{表示} \end{array}$$

由于以上对应关系的存在, 我们可以把线性代数的更多概念引入群表示理论中。

**§ 定义 2.10. 不变子空间** 如果线性空间  $V$  的子集  $W$  也是线性空间, 则称  $W$  是  $V$  的子空间。特别地, 对于  $V$  上的线性变换  $A$ , 如果对  $\forall \mathbf{x} \in W$ , 有  $A(\mathbf{x}) \in W$ , 则称  $W$  为  $V$  在  $A$  下的不变子空间。

构成子空间需要满足三要素:

1. 包含加法单位元  $\{\mathbf{0}\}$ ;
2. 子空间对加法封闭;
3. 子空间对数乘封闭。

**例 2.9.** 对于  $\mathbb{R}^3$ , 任意穿过原点的直线和平面都是其子空间。考虑绕  $z$  轴旋转任意角度的线性变换  $A$ , 则  $\mathbb{R}^3$  在  $A$  下的不变子空间为  $z$  轴和  $xy$  平面。

一般而言, 若  $V$  有  $A$  不变的真子空间  $W$  (“真”指  $W$  不是  $V$  本身或只包含  $\{0\}$ ), 设  $W$  的维度为  $m$ , 则我们可以取  $V$  的基矢为  $(\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_m, \mathbf{e}_{m+1}, \dots, \mathbf{e}_n)$ , 其中  $\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_m$  为子空间  $W$  的基矢。在该基矢下, 矩阵  $[A]$  具有以下形式

$$[A] = \begin{pmatrix} C & N \\ 0 & B \end{pmatrix}, \quad (2.32)$$

其中  $C, N, B$  分别为  $m \times m, m \times (n-m), (n-m) \times (n-m)$  矩阵。可以验证对于  $W$  中的任意矢量  $[\mathbf{y}] = (y_1, \dots, y_m, 0, \dots, 0)^T$ ,  $A\mathbf{y}$  仍属于  $W$ 。以上结果表明对于线性变换  $A$  而言, 总的线性空间  $V$  表现得可以由更基础的小的线性空间  $W$  和其余部分组合而成, 此概念也可用于群表示中。

**§ 定义 2.11. 可约表示** 设  $A$  是群  $G$  在表示空间  $V$  上的一个表示, 如果  $V$  存在一个  $G$  不变的真子空间  $W$  (“真”指的是这个空间不能为  $V$  本身或只包含零向量), 则称  $A$  是可约表示。其中  $G$  不变的真子空间  $W$ , 是指对  $\forall \mathbf{y} \in W, \forall g_\alpha \in G$ , 有  $A(g_\alpha)\mathbf{y} \in W$ 。

□ 相对的, 如果群  $G$  表示  $A$  的表示空间  $V$  不存在  $G$  不变的真子空间, 则称  $A$  是  $G$  的不可约表示。

简而言之, 如果对于任意群元  $g_\alpha \in G$ , 表示矩阵  $A(g_\alpha)$  都具有 (2.32) 式的上三角分块矩阵形式, 则  $A$  是一个可约表示。反之, 若不具备上三角分块矩阵形式, 则  $A$  不一定为不可约表示, 因为其有可能通过相似变换变成可约表示的形式。

**例 2.10.** 定轴旋转群  $SO(2)$  在  $\mathbb{R}^3$  中的表示是可约表示, 因为

$$A(C_k(\varphi)) = \begin{pmatrix} \cos \varphi & -\sin \varphi & 0 \\ \sin \varphi & \cos \varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.33)$$

有时候表示矩阵  $A$  不止具有 (2.32) 式上三角分块矩阵形式, 还具有 (2.33) 式的分块对角形式。此时对于线性变换  $A$  而言, 总的线性空间  $V$  由两个没有关联的子空间  $W_1$  和  $W_2$  拼接而成, 或称  $V$  存在直和分解。

**§ 定义 2.12. 子空间的直和** 对于群  $G$  的表示空间  $V$ ,  $W$  与  $W'$  是它的子空间, 如对  $\forall \mathbf{x} \in V$ , 都能找到  $\mathbf{y} \in W, \mathbf{z} \in W'$ , 使得  $\mathbf{x}$  可唯一地分解为:  $\mathbf{x} = \mathbf{y} + \mathbf{z}$ , 则称  $V$  是  $W$  与  $W'$  的直和。记为  $V = W \oplus W'$ 。

**注.** 若  $\mathbf{x}$  的分解不唯一, 则称  $V$  为两个子空间的和。仅有  $\mathbf{x}$  的分解是唯一的, 才能称为直和分解, 而唯一分解的充分必要条件是两个子空间  $W$  与  $W'$  仅有零矢量为公共元素:  $W \cap W' = \{0\}$ 。

**证明.** 充分性: 若任意  $\mathbf{x} \in V$  在  $W$  和  $W'$  中的分解唯一, 取任意  $\mathbf{v} \in W \cap W'$ , 因  $W$  和  $W'$  都为子空间,  $-\mathbf{v} \in W, W', -\mathbf{v} \in W \cap W'$ , 考虑  $0$  矢量的分解  $0 = \mathbf{v} + (-\mathbf{v})$ , 由于  $\pm \mathbf{v}$  同时属于  $W$  和  $W'$ , 可以认为  $\mathbf{v} \in W, -\mathbf{v} \in W'$ , 也可认为  $-\mathbf{v} \in W, \mathbf{v} \in W'$ 。因分解唯一, 只能有  $\mathbf{v} = -\mathbf{v}$ , 即  $\mathbf{v} = 0$ , 于是  $W \cap W' = \{0\}$ 。

必要性: 若  $W \cap W' = \{0\}$ , 考虑  $\mathbf{u} \in W, \mathbf{v} \in W'$ , 使得  $\mathbf{u} + \mathbf{v} = 0$ , 因为  $\mathbf{u} = -\mathbf{v} \in W'$  (子空间的性质), 所以  $\mathbf{u}$  同时属于  $W$  和  $W'$  中, 即  $\mathbf{u} = \mathbf{v} = 0$ , 因此  $0$  只能被唯一分解为  $0 + 0$ 。对于任意  $\mathbf{s} \in V$ , 若其可被分解为  $\mathbf{s} = \mathbf{u}_1 + \mathbf{v}_1 = \mathbf{u}_2 + \mathbf{v}_2$ , 其中  $\mathbf{u}_i \in W, \mathbf{v}_i \in W'$ , 则两式相减得  $0 = (\mathbf{u}_1 - \mathbf{u}_2) + (\mathbf{v}_1 - \mathbf{v}_2)$ , 由于  $0$  只能被唯一分解为  $0 + 0$ , 必然有  $\mathbf{u}_1 = \mathbf{u}_2 \in W, \mathbf{v}_1 = \mathbf{v}_2 \in W'$ , 即分解唯一。 □

与直和分解相对应的, 是完全可约的群表示。

§ 定义 2.13. 完全可约 把  $G$  的表示空间  $V$  分解为  $W$  与  $W'$  的直和, 如  $W$  与  $W'$  都是  $G$  不变的, 则称  $V$  这个表示空间完全可约。

群表示完全可约是比表示可约更强的要求, 他要求对于任意  $g_\alpha \in G$ , 表示矩阵都具有分块对角形式

$$A(g_\alpha) = \begin{pmatrix} C_\alpha & 0 \\ 0 & B_\alpha \end{pmatrix}. \quad (2.34)$$

若群表示完全可约, 则也将表示写成直和分解的形式  $A(g_\alpha) = C(g_\alpha) \oplus B(g_\alpha)$ 。故此, 任意的表示都可约化为不可约表示的直和

$$A(g_\alpha) = \sum_p \oplus m_p A_p(g_\alpha), \quad (2.35)$$

其中  $m_p$  称为不可约表示  $A_p(g_\alpha)$  的重复度。于是, 研究群表示的问题就简化成研究不可约表示的问题。

例 2.11. 3 维恒等表示  $A(g_\alpha) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}$  可被分解成 1 维恒等表示  $A_1(g_\alpha) = 1$  的直和, 即  $A(g_\alpha) = A_1(g_\alpha) \oplus A_1(g_\alpha) \oplus A_1(g_\alpha) = 3A_1(g_\alpha)$ 。

例 2.12.  $C_2 = \{e, C_z(\pi)\}$  在  $\mathbb{R}^3$  下表示的约化。

由例 2.5 已知  $\mathbb{R}^3$  下  $C_2$  的表示矩阵为

$$A(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(C_z(\pi)) = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (2.36)$$

显然表示  $A$  是完全可约的, 可约化为 1 维恒等表示  $A_1$  和 1 维非恒等表示  $A_2$  的直和  $A = A_1 \oplus 2A_2$ , 它们满足

$$A_1(e) = A_1(C_z(\pi)) = 1; \quad A_2(e) = 1, \quad A_2(C_z(\pi)) = -1. \quad (2.37)$$

例 2.13. 平面反射群  $\{e, \sigma_z\}$  在  $\mathbb{R}^3$  下表示的约化。

由例 2.5 已知  $\mathbb{R}^3$  下的表示矩阵为

$$A(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(\sigma_z) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (2.38)$$

因此表示  $A$  可约化为  $A = 2A_1 \oplus A_2$ , 而 1 维恒等表示  $A_1$  和 1 维非恒等表示  $A_2$  的定义见上一例。实际上,  $C_2$  群只有这两个不等价不可约表示。

一般而言, 完全可约是比可约要强的概念, 但是对于有限群而言, 存在以下定理。

■ 定理 2.1. 对于有限群, 表示可约则完全可约。

证明. 表示可约, 原则上只要求表示矩阵具有上三角分块形式, 即

$$A(g_\alpha) = \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha) \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix}, \quad (2.39)$$

其中  $G_1(g_\alpha), R(g_\alpha), G_2(g_\alpha)$  分别为  $m \times m, m \times (n-m), (n-m) \times (n-m)$  矩阵. 需要证明对于有限群  $G$ , 存在不随  $g_\alpha$  变化的非奇异矩阵  $P$ , 使得  $P^{-1}A(g_\alpha)P$  具有分块矩阵形式, 或

$$A(g_\alpha)P = P \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & 0 \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix}. \quad (2.40)$$

为此, 我们不妨设

$$P = \begin{pmatrix} I_m & C \\ 0 & I_{n-m} \end{pmatrix}, \quad (2.41)$$

其中  $I_m$  为  $m \times m$  的单位矩阵. 则有

$$\begin{aligned} A(g_\alpha)P &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha) \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} I_m & C \\ 0 & I_{n-m} \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & G_1(g_\alpha)C + R(g_\alpha) \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.42)$$

以及

$$\begin{aligned} P \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & 0 \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix} &= \begin{pmatrix} I_m & C \\ 0 & I_{n-m} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & 0 \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & CG_2(g_\alpha) \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.43)$$

对比 (2.42) 式和 (2.43) 式, 我们需要找到特定的  $m \times (n-m)$  的  $C$ , 满足

$$G_1(g_\alpha)C + R(g_\alpha) = CG_2(g_\alpha). \quad (2.44)$$

考虑  $A$  作为群表示, 应有  $A(g_\alpha)A(g_\beta) = A(g_\alpha g_\beta)$ , 即

$$\begin{aligned} A(g_\alpha)A(g_\beta) &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & R(g_\alpha) \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix} \begin{pmatrix} G_1(g_\beta) & R(g_\beta) \\ 0 & G_2(g_\beta) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha)G_1(g_\beta) & G_1(g_\alpha)R(g_\beta) + R(g_\alpha)G_2(g_\beta) \\ 0 & G_2(g_\alpha)G_2(g_\beta) \end{pmatrix} \\ &= \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha g_\beta) & R(g_\alpha g_\beta) \\ 0 & G_2(g_\alpha g_\beta) \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.45)$$

亦即

$$G_1(g_\alpha g_\beta) = G_1(g_\alpha)G_1(g_\beta), \quad G_2(g_\alpha g_\beta) = G_2(g_\alpha)G_2(g_\beta), \quad (2.46)$$

$$G_1(g_\alpha)R(g_\beta) + R(g_\alpha)G_2(g_\beta) = R(g_\alpha g_\beta). \quad (2.47)$$

若取  $g_\beta = g_\alpha^{-1}$ , 则有

$$G_1(g_\alpha)G_1(g_\alpha^{-1}) = I_m, \quad G_2(g_\alpha)G_2(g_\alpha^{-1}) = I_n, \quad (2.48)$$

$$G_1(g_\alpha) R(g_\alpha^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) = 0. \quad (2.49)$$

将 (2.48) 式代入 (2.44) 式有

$$G_1(g_\alpha) C G_2(g_\alpha^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) = C. \quad (2.50)$$

(2.50) 式指出  $C$  应该具有类似于  $R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1})$  的形式, 但因  $C$  为  $P$  的一部分, 应不随  $g_\alpha$  变化, 所以我们考虑取

$$C = \frac{1}{n_G} \sum_{g \in G} R(g) G_2(g^{-1}), \quad (2.51)$$

其中  $n_G = |G|$  为群阶。将其代入 (2.50) 式等号左边有

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n_G} \sum_{g \in G} G_1(g_\alpha) R(g) G_2(g^{-1}) G_2(g_\alpha^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) \\ &= \frac{1}{n_G} \sum_{g \in G} G_1(g_\alpha) R(g) G_2(g^{-1} g_\alpha^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) \\ &= \frac{1}{n_G} \sum_{g \in G} G_1(g_\alpha) R(g) G_2((g_\alpha g)^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}), \end{aligned} \quad (2.52)$$

其中已利用 (2.46) 式。记  $g_\alpha g = h$ ,  $g = g_\alpha^{-1} h$ , 由重排定理知当  $g$  取遍  $G$  时,  $h$  也取遍  $G$ , 因此 (2.52) 式变为

$$\frac{1}{n_G} \sum_{h \in G} G_1(g_\alpha) R(g_\alpha^{-1} h) G_2(h^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}). \quad (2.53)$$

根据 (2.47) 式有

$$R(g_\alpha^{-1} h) = G_1(g_\alpha^{-1}) R(h) + R(g_\alpha^{-1}) G_2(h), \quad (2.54)$$

即可进一步化简 (2.53) 式为

$$\begin{aligned} & \frac{1}{n_G} \sum_{h \in G} G_1(g_\alpha) [G_1(g_\alpha^{-1}) R(h) + R(g_\alpha^{-1}) G_2(h)] G_2(h^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) \\ &= \frac{1}{n_G} \sum_{h \in G} R(h) G_2(h^{-1}) + \frac{1}{n_G} G_1(g_\alpha) R(g_\alpha^{-1}) \sum_{h \in G} G_2(h) G_2(h^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) \\ &= C + G_1(g_\alpha) R(g_\alpha^{-1}) + R(g_\alpha) G_2(g_\alpha^{-1}) \\ &= C, \end{aligned} \quad (2.55)$$

其中已利用 (2.48)、(2.49) 式。因此, 的确存在不随  $g_\alpha$  变化的  $C$  和  $P$  矩阵, 使得

$$P^{-1} A(g_\alpha) P = \begin{pmatrix} G_1(g_\alpha) & 0 \\ 0 & G_2(g_\alpha) \end{pmatrix}, \quad (2.56)$$

所以有限群表示可约则完全可约。  $\square$

以上证明构造的不随群元  $g_\alpha$  变化的  $C$  和  $P$  矩阵, 依赖于对全体群元的求和, 因此该定理只对有限群成立。对于无限群, 可约表示不一定是完全可约的。我们考虑 1 维平移群  $T = \{T(a) | a \in \mathbb{R}\}$ , 其中平移操作满足  $T(a)x = x+a$ , 单位元为  $T(0)$ , 逆元为  $T(a)^{-1} = T(-a)$ , 而且为 Abel 群:  $T(a)T(b) = T(a+b) = T(b+a)$ 。我们将看到, 对于这个简单的无限群, 其可约表示不一定是完全可约的。

以  $\{1, x\}$  作为平移群  $T$  的表示空间, 任意群元对基函数的作用为

$$T(a)1 = 1 + 0x, \quad T(a)x = a + x, \quad (2.57)$$

因此  $T(a)$  的表示矩阵为

$$A(T(a)) = \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix}. \quad (2.58)$$

因为对于任意  $T(a) \in T$ ,  $A(T(a))$  都具有上三角分块矩阵形式, 因此表示  $A$  是可约表示, 其中由  $\{1\}$  生成的子空间  $W$  是  $T$  不变的。因为  $W$  中任意的矢量都可表示为  $\mathbf{s} = (1, x) \begin{pmatrix} s \\ 0 \end{pmatrix}$ , 对于任意  $T(a) \in T$ , 都有

$$\begin{aligned} T(a)\mathbf{s} &= (1, x) A(T(a)) \begin{pmatrix} s \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= (1, x) \begin{pmatrix} 1 & a \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= (1, x) \begin{pmatrix} s \\ 0 \end{pmatrix} \\ &= \mathbf{s}, \end{aligned} \quad (2.59)$$

即  $W$  是  $T$  不变的。但是  $A$  不是完全可约的, 因为由  $\{x\}$  生成的子空间  $W'$  并不是  $\{1, x\}$  的不变子空间。

至此, 我们总结一下群表示理论的几个结果。

1. 群  $G$  的不可约表示矩阵不具有对角或三角形式。
2. 一般地, 群  $G$  的表示空间  $V$  可以表示为不可进一步分解的  $G$  不变子空间的直和, 而  $G$  在  $V$  上的表示可以写为  $G$  在这些不可分解的子空间上的不可约表示的直和:

$$A(g_\alpha) = \sum_p \oplus m_p A_p(g_\alpha). \quad (2.60)$$

3. 有限群的任何表示都可以写成其不等价不可约表示的直和, 故寻找一个群的所有不等价不可约表示有重要意义。

为方便理解以下例子, 我们先不予证明地给出下面两个关于  $n$  阶有限群表示的重要结论, 这两个结论会在后文证明。

- 不等价不可约表示的个数为类的个数。
- 若  $n$  阶有限群只有  $q$  个不等价不可约表示, 记每个不可约表示的维度为  $S_i$ , 则有

$$S_1^2 + S_2^2 + \cdots + S_q^2 = n. \quad (2.61)$$

**例 2.14.**  $C_3 = \{e, C_3, C_3^2\}$  的不等价不可约表示。

Abel 群  $C_3$  具有三个类:  $\{e\}, \{C_3\}, \{C_3^2\}$ , 因此  $C_3$  群只有三个不等价不可约表示  $A_1, A_2, A_3$ , 并且利用  $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = 3$  可知  $A_1, A_2, A_3$  均为 1 维表示。对于 1 维表示, 有  $A_1(e) = A_2(e) = A_3(e) = 1$ 。我们取  $A_1$  为 1 维恒等表示, 即  $A_1(e) = A_1(C_3) = A_1(C_3^2) = 1$ 。对于其余两个 1 维非恒等表示, 仍需确定  $A_i(C_3), A_i(C_3^2)$ 。

同态映射保持群乘法结构, 因此

$$[A_i(C_3)]^2 = A_i(C_3^2), [A_i(C_3)]^3 = A_i(e) = 1, \quad (2.62)$$

于是  $[A_i(C_3)]^3 = 1$  的三个解  $1, e^{i2\pi/3}, e^{-i2\pi/3}$ , 对应三个 1 维不可约表示, 因此求出  $C_3$  的三个不等价不可约表示为

$C_3$	$e$	$C_3$	$C_3^2$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	$\omega$	$\omega^2$
$A_3$	1	$\omega^2$	$\omega$

其中  $\omega = e^{i2\pi/3}$ 。

**例 2.15.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的不等价不可约表示。

$D_3$  群有三个类  $\{e\}, \{d, f\}, \{a, b, c\}$ , 因此有三个不等价不可约表示  $A_1, A_2, A_3$ 。因  $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = 6$ , 可知  $A_1, A_2$  为 1 维表示,  $A_3$  为二维表示。 $A_1$  取为 1 维恒等表示  $A_1(g_\alpha) = 1$ 。对于 1 维非恒等表示  $A_2$ , 可以利用  $D_3/C_3 \cong C_2$  即同态关系  $D_3 \sim C_2$  得到。因为  $C_2 = \{1, -1\}$  仅有两个 1 维表示, 其中 1 维非恒等表示是自身表示, 因此  $D_3$  的 1 维非恒等表示应有以下关系:

$$A_2 : C_3 \xrightarrow{\phi} 1, aC_3 \xrightarrow{\phi} -1, \quad (2.63)$$

其中  $C_3 = \{e, d, f\}$  为  $D_3$  到  $C_2$  的同态映射  $\phi$  的同态核。

对于 2 维表示  $A_3$ , 我们可选  $\{\psi_1(\mathbf{r}) = x, \psi_2(\mathbf{r}) = y\}$  为表示空间, 构造群表示。以  $d$  为例, 因

$$\begin{aligned} d^{-1}\mathbf{r} &= f\mathbf{r} \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}) \begin{pmatrix} -\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y \\ -\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (2.64)$$

于是

$$\begin{aligned} d\psi_1(\mathbf{r}) &= \psi_1(f\mathbf{r}) = -\frac{1}{2}\psi_1(\mathbf{r}) + \frac{\sqrt{3}}{2}\psi_2(\mathbf{r}), \\ d\psi_2(\mathbf{r}) &= \psi_2(f\mathbf{r}) = -\frac{\sqrt{3}}{2}\psi_1(\mathbf{r}) - \frac{1}{2}\psi_2(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (2.65)$$

即

$$A_3(d) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}, \quad (2.66)$$

同理得到其他群元的表示矩阵。

可以总结出  $D_3$  的不等价不可约表示为

$D_3$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$A_1$	1	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_3$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

显然, 以写出群的表示矩阵来研究群表示, 存在两个问题: 一是写出表示矩阵非常繁琐, 特别是高维表示的情况; 二是由于等价表示的存在, 表示矩阵的形式并不唯一。于是我们希望找到描述群表示的更为简洁

和唯一的量, 注意到矩阵的迹能一定程度描述矩阵的性质, 且不会随相似变换发生改变, 于是可以用其描述群表示。

**§ 定义 2.14. 特征标** 设  $A = \{A(g_\alpha)\}$  是群  $G = \{g_\alpha\}$  的一个表示, 这个表示的特征标定义为  $\{\chi(g_\alpha)\}$ , 其中

$$\chi(g_\alpha) = \text{tr} A(g_\alpha) = \sum_{\mu} A_{\mu\mu}(g_\alpha).$$

特征标因具有以下特点而可以更好地描述群表示。

**注 1.** 等价表示的特征标相同。

证明.  $\text{tr} [P^{-1}A(g_\alpha)P] = \text{tr} [A(g_\alpha)PP^{-1}] = \text{tr} A(g_\alpha) = \chi(g_\alpha)$ . □

**注 2.** 同一个表示中, 共轭元素的特征标相同。

证明.  $\text{tr} A(g_\beta^{-1}g_\alpha g_\beta) = \text{tr} [A(g_\beta^{-1})A(g_\alpha)A(g_\beta)] = \text{tr} [A(g_\alpha)A(g_\beta)A(g_\beta^{-1})] = \text{tr} A(g_\alpha) = \chi(g_\alpha)$ . □

**注 3.** 特征标是类的函数。由上一条结果易证。

**注 4.** 单位元自成一类, 特征标等于表示维度。

证明.  $\text{tr} A(e) = \text{tr} I_{S_A} = S_A$ . □

由于特征标是类的函数, 且有限群不等价不可约表示的个数等于类的个数  $n_c$ , 因此有限群  $G$  的不等价不可约表示由一个  $n_c \times n_c$  的表格刻画, 称为**特征标表**。

对于  $C_2, C_3, D_3$ , 我们已经可写出它们的特征标表见表2.1-2.3。

	$C_2$	$\{e\}$	$\{C_2\}$
$C_2$	$\{e\}$	$\{C_2\}$	
$A_1$	1	1	
$A_2$	1	-1	

表 2.1:  $C_2$  群的特征标表。

	$C_3$	$\{e\}$	$\{C_3\}$	$\{C_3^2\}$
$C_3$	$\{e\}$	$\{C_3\}$	$\{C_3^2\}$	
$A_1$	1	1	1	
$A_2$	1	$\omega$	$\omega^2$	
$A_3$	1	$\omega^2$	$\omega$	

表 2.2:  $C_3$  群的特征标表。

	$D_3$	$\{e\}$	$2\{C_3\}$	$3\{C_2'\}$
$D_3$	$\{e\}$	$2\{C_3\}$	$3\{C_2'\}$	
$A_1$	1	1	1	
$A_2$	1	1	-1	
$A_3$	2	-1	0	

表 2.3:  $D_3$  群的特征标表。

**例 2.16.**  $D_{2n} = \{e, C_{2n}, \dots, C_{2n}^{2n-1}, S_0, \dots, S_{2n-1}\}$  群的 1 维不等价不可约表示。

我们已知  $D_{2n}$  群有一个  $2n$  次的双向轴, 和  $2n$  个 2 次轴, 一共有  $n + 3$  个类:  $\{e\}$ ,  $\{C_{2n}^m, C_{2n}^{-m}\}$  ( $n - 1$  个),  $\{C_{2n}^n\}$ ,  $\{S_0, \dots, S_{2n-2}\}$ ,  $\{S_1, \dots, S_{2n-1}\}$ 。因此  $D_{2n}$  群有  $n + 3$  个不等价不可约表示, 利用  $4 + (n - 1)2^2 = 4n$ , 可知  $A_1, \dots, A_4$  为 4 个 1 维表示, 其余  $n - 1$  个表示是 2 维表示。习惯上取  $A_1$  为 1 维恒等表示  $A_1(g) = 1$ , 其余三个 1 维非恒等表示由三个商群关系给出:  $D_{2n}/C_{2n} \cong C_2$ ,  $D_{2n}/D_n \cong C_2$ ,  $D_{2n}/D'_n \cong C_2$ , 其中  $D_n$  和  $D'_n$  分别为  $\{e, C_{2n}^2, \dots, C_{2n}^{2(n-1)}\}$  加上  $\{S_0, \dots, S_{2n-2}\}$  或  $\{S_1, \dots, S_{2n-1}\}$  组成的不变子群。所以我们可以写出  $D_{2n}$  的四个 1 维表示为

$D_{2n}$	$\{e\}$	含 $C_{2n}$ 偶次幂的类	含 $C_{2n}$ 奇次幂的类	$\{S_0\}$	$\{S_1\}$	
$A_1$	1	1	1	1	1	1 维恒等表示
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$D_{2n}/C_{2n} \cong C_2$
$A_3$	1	1	-1	1	-1	$D_{2n}/D_n \cong C_2$
$A_4$	1	1	-1	-1	1	$D_{2n}/D'_n \cong C_2$

我们已从向量空间的性质中得到一些群表示的基本性质, 比如通过商群及同态关系, 我们能写出部分有限群的 1 维不等价不可约表示, 然而我们仍无法轻易写出高维的群表示。其背后原因是普通的向量空间结构太简单, 无法给出群表示的更多信息。为此, 我们需要在原来的线性向量空间中加入一些常见的结构, 使其能反映群表示结构的更多信息。一般而言, 我们可以在线性空间中依次加入范数 (norm), 夹角 (angle), 完备性 (completeness) 等概念要求, 使其变成其他空间, 即

$$\text{线性空间} \xrightarrow{\text{norm}} \text{赋范空间} \xrightarrow{\text{angle}} \text{内积空间} \xrightarrow{\text{completeness}} \text{Hilbert 空间}$$

内积空间是最常用的, 因为在定义了内积后, 可以很自然地定义范数、夹角、正交等概念, 而且内积空间总存在正交归一的基矢。常见的欧几里得空间就是一个内积空间, 内积空间是一个抽象的空间, 而欧几里得空间是一个具象化了的内积空间。为此, 我们先复习内积空间的定义。

**§ 定义 2.15. 内积空间** 设  $V$  是定义在数域  $\mathbb{C}$  上的线性空间, 将  $V$  中两个有序向量  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  映为  $\mathbb{C}$  上的一个数  $(\mathbf{x}|\mathbf{y}) \in \mathbb{C}$ , 满足:

1.  $(\mathbf{x} + \mathbf{y}|\mathbf{z}) = (\mathbf{x}|\mathbf{z}) + (\mathbf{y}|\mathbf{z});$
2.  $(\mathbf{x}|a\mathbf{y}) = a(\mathbf{x}|\mathbf{y});$
3.  $(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = (\mathbf{y}|\mathbf{x})^*$  (共轭);
4.  $(\mathbf{x}|\mathbf{x}) \geq 0$ ,  $\mathbf{x} = \mathbf{0}$  时等号成立。

则称  $(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  为  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{y}$  的内积, 而定义了内积的线性空间  $V$  称为内积空间。

**注.** 定义了内积后, 可以自然地定义一个范数  $|\mathbf{x}| = \sqrt{(\mathbf{x}|\mathbf{x})}$ , 以及两个非零向量间的夹角  $\text{angle}(\mathbf{x}, \mathbf{y}) = \arccos \frac{(\mathbf{x}|\mathbf{y})}{|\mathbf{x}||\mathbf{y}|}$ 。若内积空间  $V$  中的两个向量  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  满足  $(\mathbf{x}|\mathbf{y}) = 0$ , 则称  $\mathbf{x}, \mathbf{y}$  正交。

**推论.** 内积空间总存在正交归一基, 归一指  $|\mathbf{x}| = 1$ 。

**证明.** 使用 Gram-Schmidt 正交化方案, 设  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$  为内积空间  $V$  的一组基, 则可以依次构造

$$\begin{aligned} \mathbf{e}'_1 &= \frac{\mathbf{e}_1}{|\mathbf{e}_1|}, \\ \mathbf{e}''_2 &= \frac{\mathbf{e}'_2}{|\mathbf{e}'_2|}, \quad \mathbf{e}'_2 = \mathbf{e}_2 - (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_2) \mathbf{e}'_1, \\ \mathbf{e}''_3 &= \frac{\mathbf{e}'_3}{|\mathbf{e}'_3|}, \quad \mathbf{e}'_3 = \mathbf{e}_3 - (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_3) \mathbf{e}'_1 - (\mathbf{e}'_2|\mathbf{e}_3) \mathbf{e}'_2, \\ &\dots \\ \mathbf{e}''_n &= \frac{\mathbf{e}'_n}{|\mathbf{e}'_n|}, \quad \mathbf{e}'_n = \mathbf{e}_n - \sum_{i=1}^{n-1} (\mathbf{e}'_i|\mathbf{e}_n) \mathbf{e}'_i, \end{aligned}$$

若记  $\mathbf{e}''_1 = \mathbf{e}'_1$ , 则  $\{\mathbf{e}''_1, \dots, \mathbf{e}''_n\}$  构成  $V$  的一组正交归一基, 因为构造的过程中把所有投影部分都去除了, 由归纳法可证

$$(\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}'_2) = (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_2 - (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_2) \mathbf{e}'_1) = (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_2) - (\mathbf{e}'_1|\mathbf{e}_2) = 0,$$

$$\begin{aligned}
(\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}'_n) &= \left( \mathbf{e}'_j|\mathbf{e}_n - \sum_{i=1}^{n-1} (\mathbf{e}'_i|\mathbf{e}_n) \mathbf{e}'_i \right) \quad (j < n) \\
&= (\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (\mathbf{e}'_i|\mathbf{e}_n) (\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}'_i) \\
&= (\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}_n) - \sum_{i=1}^{n-1} (\mathbf{e}'_i|\mathbf{e}_n) \delta_{ij} \\
&= (\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}_n) - (\mathbf{e}'_j|\mathbf{e}_n) \\
&= 0.
\end{aligned}$$

□

在正交归一基下, 可以利用坐标表示内积

$$\begin{aligned}
(\mathbf{x}|\mathbf{y}) &= \sum_{ij} (x_i \mathbf{e}_i | y_j \mathbf{e}_j) \\
&= \sum_{ij} x_i^* y_j (\mathbf{e}_i | \mathbf{e}_j) \\
&= \sum_{ij} x_i^* y_j \delta_{ij} \\
&= \sum_i x_i^* y_i \tag{2.67}
\end{aligned}$$

有了内积的定义, 我们可以考虑一类特殊的线性变换。

**§ 定义 2.16. 酉变换 (么正变换)** 设  $U$  是内积空间  $V$  上的线性变换, 若对任意  $\mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ ,  $U$  保持  $\mathbf{x}$  和  $\mathbf{y}$  的内积不变, 即:  $(U\mathbf{x}|U\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ , 则称  $U$  为  $V$  上的酉变换。

显然, 两个酉变换的相继操作也是酉变换, 因为对任意两个酉变换  $U$  和  $W$ , 有  $(WU\mathbf{x}|WU\mathbf{y}) = (U\mathbf{x}|U\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ , 即  $WU$  也是酉变换。因此, 容易证明所有非奇异酉变换也构成  $GL(V, \mathbb{C})$  的一个子群, 即酉变换群。利用酉变换群同样能定义群表示。

**§ 定义 2.17. 酉表示** 群  $G$  到内积空间  $V$  中的酉变换群  $L$  上的同态映射  $A$ , 称为群  $G$  的酉表示。

定义  $(U\mathbf{x}|\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|U^\dagger\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|U^{-1}\mathbf{y})$ , 即酉变换具有性质  $U^\dagger U = U U^\dagger = I$ , 所以酉表示有额外的性质  $\forall g_\alpha \in G, A(g_\alpha)^\dagger = A(g_\alpha)^{-1} = A(g_\alpha^{-1})$ , 具体表示则为

$$[A(g_\alpha)]_{ij}^\dagger = [A(g_\alpha)]_{ji}^* = [A(g_\alpha^{-1})]_{ij}. \tag{2.68}$$

对于酉表示, 也有以下重要定理。

**■ 定理 2.2.** 酉表示可约则完全可约。

证明. 首先定义正交补空间: 在内积空间  $V$  中, 若  $W$  是  $V$  的子空间, 则  $W^\perp = \{\mathbf{x} | (\mathbf{x}|\mathbf{x}_1) = 0, \mathbf{x} \in V, \mathbf{x}_1 \in W\}$  称为  $V$  中  $W$  的正交补空间。而且有  $V = W \oplus W^\perp$ , 因为  $(\mathbf{0}|\mathbf{x}_1) = 0 (\mathbf{x}_1 \in W)$  即  $\mathbf{0} \in W^\perp$ , 因此  $W \cap W^\perp = \{\mathbf{0}\}$ 。

现在酉表示可约, 因此可取  $W$  为  $G$  不变的子空间, 即  $\forall \mathbf{y} \in W, g_\alpha \in G$ , 都有  $A(g_\alpha)\mathbf{y} \in W$ 。因此我们只需证明  $W$  的正交补空间  $W^\perp$  也是  $G$  不变的即可。对于  $\forall \mathbf{y} \in W, \mathbf{z} \in W^\perp$ , 考虑  $A(g_\alpha)\mathbf{z}$  与  $\mathbf{y}$  的内积, 有

$$\begin{aligned} (A(g_\alpha)\mathbf{z}|\mathbf{y}) &= (\mathbf{z}|A(g_\alpha)^\dagger\mathbf{y}) \\ &= (\mathbf{z}|A(g_\alpha^{-1})\mathbf{y}) \\ &= (\mathbf{z}|\mathbf{y}') \\ &= 0, \end{aligned} \tag{2.69}$$

其中已利用  $W$  是  $G$  不变的性质。因此,  $A(g_\alpha)\mathbf{z} \in W^\perp$ , 即  $W^\perp$  也是  $G$  不变的。因此表示空间  $V$  可以分解成两个  $G$  不变的子空间的直和, 即酉表示  $A$  完全可约。□

注. 该定理不要求  $G$  为有限群, 因此对无限群也成立。

可以看到, 对于有限群而言表示可约则完全可约; 另一方面, 对于内积空间中的酉表示, 表示可约则也完全可约。可见有限群线性空间的表示和内积空间的酉表示存在一定的联系。

■ **定理 2.3.** 有限群在内积空间的每一个表示都有等价的酉表示。

证明. 设  $A$  为有限群  $G$  在内积空间  $V$  上的一个表示, 显然, 当  $A$  不是酉表示的时候, 对  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in V$ , 内积  $(A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y})$  一般不等于  $(\mathbf{x}|\mathbf{y})$ 。我们需要证明的, 是对于表示  $A$ , 存在一个等价表示  $B(g_\alpha) = X^{-1}A(g_\alpha)X$ , 使得表示  $B$  是酉表示, 即  $(B(g_\alpha)\mathbf{x}|B(g_\alpha)\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ 。

实际上, 在内积空间可以定义不同的内积形式, 又因为正交归一的概念依赖于内积的形式, 所以不同的内积形式将给出不同的正交归一基。对于同一个表示  $A$ , 它虽然会使原来定义的内积发生改变  $(A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y}) \neq (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ , 但可能会保持另一种内积形式不变  $(A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ 。因此, 联系不同内积定义下的正交归一基之间的线性变换, 将给出表示  $A$  的等价表示  $A$ 。

假设我们已找到一种内积形式  $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle$ , 使表示  $A$  保持这种内积不变  $\langle A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle$ , 该内积可给出一组  $V$  的正交归一基  $\{\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n\}$ 。相应地, 设原来内积的定义  $(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  给出的正交归一基矢为  $\{\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n\}$ 。具体而言, 正交归一关系为

$$(\mathbf{e}_i|\mathbf{e}_j) = \langle \mathbf{f}_i|\mathbf{f}_j \rangle = \delta_{ij}, \tag{2.70}$$

$\delta_{ij}$  为 Kronecker 符号。两组基之间可通过非奇异的线性变换  $X$  联系, 即

$$(\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n) = (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [X], \tag{2.71}$$

则  $V$  中的矢量可表达为

$$\begin{aligned} \mathbf{x} &= (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [\mathbf{x}] \\ &= (\mathbf{f}_1, \dots, \mathbf{f}_n) [\mathbf{x}]' \\ &= (\mathbf{e}_1, \dots, \mathbf{e}_n) [X] [\mathbf{x}]', \end{aligned} \tag{2.72}$$

因此不同基下的坐标关系为

$$[\mathbf{x}]' = [X^{-1}] [\mathbf{x}]. \tag{2.73}$$

利用坐标表示内积, 有

$$\begin{aligned}
 (\mathbf{x}|\mathbf{y}) &= \sum_i x_i^* y_i \\
 &= (x_1^*, \dots, x_n^*) \begin{pmatrix} y_1 \\ \vdots \\ y_n \end{pmatrix} \\
 &= [\mathbf{x}]^\dagger [\mathbf{y}].
 \end{aligned} \tag{2.74}$$

同理有

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle = [\mathbf{x}]'^\dagger [\mathbf{y}]'. \tag{2.75}$$

代入关系 (2.73) 式有  $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle = ([X^{-1}][\mathbf{x}])^\dagger [X^{-1}][\mathbf{y}]$ , 或者

$$\begin{aligned}
 \langle X\mathbf{x}|X\mathbf{y} \rangle &= ([X^{-1}][X][\mathbf{x}])^\dagger [X^{-1}][X][\mathbf{y}] \\
 &= [\mathbf{x}]^\dagger [\mathbf{y}] \\
 &= (\mathbf{x}|\mathbf{y}).
 \end{aligned} \tag{2.76}$$

因此, 两种内积的关系由基变换  $X$  联系起来。现在考虑等价表示  $B(g_\alpha) = X^{-1}A(g_\alpha)X$ , 则

$$\begin{aligned}
 \langle B(g_\alpha)\mathbf{x}|B(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle &= \langle XB(g_\alpha)\mathbf{x}|XB(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle \\
 &= \langle A(g_\alpha)X\mathbf{x}|A(g_\alpha)X\mathbf{y} \rangle \\
 &= \langle X\mathbf{x}|X\mathbf{y} \rangle \\
 &= (\mathbf{x}|\mathbf{y}),
 \end{aligned} \tag{2.77}$$

其中第一、四个等号利用了 (2.76) 式, 第二个等号利用了内积  $\langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle$  在  $A$  表示中是保持不变的。于是等价表示  $B(g_\alpha) = X^{-1}A(g_\alpha)X$  保持原来的内积定义  $(\mathbf{x}|\mathbf{y})$  不变, 即  $B$  是酉表示。

因此, 核心在于构造一个满足  $\langle A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle = \langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle$  的内积定义。考虑到有限群结构, 可以做以下内积定义:

$$\langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle = \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \langle A(g)\mathbf{x}|A(g)\mathbf{y} \rangle. \tag{2.78}$$

利用重排定理,  $\forall g_\alpha \in G$ , 有

$$\begin{aligned}
 \langle A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle &= \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \langle A(g)A(g_\alpha)\mathbf{x}|A(g)A(g_\alpha)\mathbf{y} \rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \langle A(gg_\alpha)\mathbf{x}|A(gg_\alpha)\mathbf{y} \rangle \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{g' \in G} \langle A(g')\mathbf{x}|A(g')\mathbf{y} \rangle \\
 &= \langle \mathbf{x}|\mathbf{y} \rangle.
 \end{aligned} \tag{2.79}$$

因此, 对于有限群, 总能找到一种内积定义在表示  $A$  下是保持不变的, 或者总能找到一个非奇异线性变换, 使表示  $A$  等价于一个酉表示。□

### 2.3 群代数与群函数

之前，我们在线性空间中定义了向量加法与数乘，若进一步定义向量间的乘法，则形成线性代数。

**§ 定义 2.18. 线性代数** 设  $R$  是数域  $K$  上的线性空间，在  $R$  上可定义乘法，如该乘法对  $\forall \mathbf{x}, \mathbf{y}, \mathbf{z} \in R, \forall a \in K$ ，有：

1.  $\mathbf{xy} \in R$  (两个向量的乘积仍然是这个线性空间的向量)；
2.  $\mathbf{x}(\mathbf{y} + \mathbf{z}) = \mathbf{xy} + \mathbf{xz}$  (乘法分配律)；
3.  $a(\mathbf{xy}) = (a\mathbf{x})\mathbf{y} = \mathbf{x}(a\mathbf{y})$  (数乘可结合交换)；

则称为  $R$  是线性代数。当结合律进一步成立的时候，即  $(\mathbf{xy})\mathbf{z} = \mathbf{x}(\mathbf{yz})$ ，对应的代数为结合代数。

有了线性空间、线性代数等定义后，我们可以用群元  $g$  构造为矢量，来构建群空间和群代数。

**§ 定义 2.19. 群空间** 设  $\mathbb{C}$  是复数域， $G = \{g_\alpha\}$  是一个群。以这些元素的线性组合为向量，对它们定义加法与数乘，使得对  $\forall \mathbf{x} = \sum_\alpha x_\alpha g_\alpha, \forall \mathbf{y} = \sum_\alpha y_\alpha g_\alpha, x_\alpha, y_\alpha, a \in \mathbb{C}$ ，有： $\mathbf{x} + \mathbf{y} = \sum_\alpha (x_\alpha + y_\alpha) g_\alpha, a\mathbf{x} = \sum_\alpha (ax_\alpha) g_\alpha$ ，那么这些向量的组合形成一个线性空间，称为群空间，记为  $V_G$ 。

**§ 定义 2.20. 群代数** 在群空间的基础上进一步定义乘法规则，对  $\forall \mathbf{x} = \sum_\alpha x_\alpha g_\alpha, \forall \mathbf{y} = \sum_\beta y_\beta g_\beta$ ，有： $\mathbf{xy} = \sum_{\alpha\beta} x_\alpha y_\beta (g_\alpha g_\beta)$ 。我们把这个群空间基于上述定义的向量乘法形成的代数称为群代数，记为  $R_G$ 。

**注.** 对于群代数，群结构要求具有以下关系，对  $\forall \mathbf{x} = \sum_\alpha x_\alpha g_\alpha = \sum_\alpha x(g_\alpha) g_\alpha, \mathbf{y} = \sum_\beta y_\beta g_\beta = \sum_\beta y(g_\beta) g_\beta, \mathbf{xy} = \sum_\gamma (xy)_\gamma g_\gamma$ ，则

$$(xy)_\gamma = \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1} g_\gamma). \quad (2.80)$$

证明. 对于  $\mathbf{x} = \sum_\alpha x(g_\alpha) g_\alpha, \mathbf{y} = \sum_\beta y(g_\beta) g_\beta$ ，有

$$\begin{aligned} \mathbf{xy} &= \left( \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) g_\alpha \right) \left( \sum_{g_\beta} y(g_\beta) g_\beta \right) \\ &= \sum_{g_\alpha g_\beta} (x(g_\alpha) y(g_\beta)) g_\alpha g_\beta, \end{aligned}$$

令  $g_\alpha g_\beta = g_\gamma$ ，即  $g_\beta = g_\alpha^{-1} g_\gamma$ ，则

$$\begin{aligned} \mathbf{xy} &= \sum_{g_\alpha g_\gamma} (x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1} g_\gamma)) g_\gamma \\ &= \sum_\gamma (xy)_\gamma g_\gamma, \end{aligned}$$

对比得

$$(xy)_\gamma = \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1} g_\gamma).$$

□

**例 2.17.** 以  $C_3 = \{e, d, f\}$  构建群代数, 两个矢量  $\mathbf{x} = e + 2d + 3f$  和  $\mathbf{y} = 2e + 2d + f$  的乘积为

$$\begin{aligned}\mathbf{xy} &= (e + 2d + 3f)(2e + 2d + f) \\ &= 10e + 9d + 11f.\end{aligned}$$

或者利用 (2.80) 式, 有

$$\begin{aligned}(xy)_e &= \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1}e) \\ &= x(e)y(ee) + x(d)y(fe) + x(f)y(de) \\ &= 1 \cdot 2 + 2 \cdot 1 + 3 \cdot 2 \\ &= 10,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(xy)_d &= \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1}d) \\ &= x(e)y(ed) + x(d)y(fd) + x(f)y(dd) \\ &= 1 \cdot 2 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 1 \\ &= 9,\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}(xy)_f &= \sum_{g_\alpha} x(g_\alpha) y(g_\alpha^{-1}f) \\ &= x(e)y(ef) + x(d)y(ff) + x(f)y(df) \\ &= 1 \cdot 1 + 2 \cdot 2 + 3 \cdot 2 \\ &= 11,\end{aligned}$$

即

$$\mathbf{xy} = 10e + 9d + 11f.$$

显然, 我们可用群自身定义的群代数作为表示空间, 由此可以定义正则表示, 又分为左正则表示和右正则表示。

**§ 定义 2.21. 左正则表示** 取群  $G$  的群代数空间  $R_G$  为群  $G$  的表示空间, 定义  $G$  到  $R_G$  上的线性变换群  $L(G)$  的映射为  $L: G \rightarrow L(G)$ , 线性变换  $L(g_i) \in L(G)$  定义为:  $L(g_i)\mathbf{x} = g_i\mathbf{x}$ , 则映射  $L$  保持了群的乘法结构不变, 为同构映射,  $L(G)$  称为群  $G$  的左正则表示。

**§ 定义 2.22. 右正则表示** 同上, 定义  $G$  到  $R_G$  上的线性变换群  $R(G)$  的映射为  $R: G \rightarrow R(G)$ , 线性变换  $R(g_i) \in R(G)$  定义为:  $R(g_i)\mathbf{x} = \mathbf{x}g_i^{-1}$ , 则  $R(G)$  称为群  $G$  的右正则表示。

**注.** 右正则表示中取逆是为了保持乘法规律不变,  $R(g_i)R(g_j)\mathbf{x} = \mathbf{x}g_j^{-1}g_i^{-1} = \mathbf{x}(g_i g_j)^{-1} = R(g_i g_j)\mathbf{x}$ 。

原则上, 只需求出线性变化对基的变化便可得到表示矩阵, 正则表示的特殊之处在于对基的变换和矢量的基都由群元承担, 即

$$L(g_i) \underbrace{g_j}_{\text{基}} = \underbrace{g_i g_j}_{\text{变换 基}}, \quad R(g_i) \underbrace{g_j}_{\text{基}} = \underbrace{g_j g_i^{-1}}_{\text{基 变换}}, \quad (2.81)$$

因此, 重排定理保证正则表示的矩阵只有 0 和 1 构成, 且每行每列只有一个 1。

**例 2.18.**  $C_2 = \{e, a\}$  的左正则表示。

先写出  $L(e)$  对基的变换:

$$L(e)e = ee = e = (e, a) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$L(e)a = ea = a = (e, a) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}.$$

因此  $L(e)$  的表示矩阵为

$$L(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}.$$

同理, 写出  $L(a)$  对基的变换:

$$L(a)e = ae = a = (e, a) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

$$L(a)a = aa = e = (e, a) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}.$$

即  $L(a)$  的表示矩阵为

$$L(a) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}.$$

**例 2.19.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的左正则表示。

方便起见, 可先写出  $D_3$  群的乘法表如下

$D_3$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$e$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$d$	$d$	$f$	$e$	$c$	$a$	$b$
$f$	$f$	$e$	$d$	$b$	$c$	$a$
$a$	$a$	$b$	$c$	$e$	$d$	$f$
$b$	$b$	$c$	$a$	$f$	$e$	$d$
$c$	$c$	$a$	$b$	$d$	$f$	$e$

以  $a$  为例, 写出  $L(a)$  对基的变换为

$$L(a)e = a, \quad L(a)d = b, \quad L(a)f = c,$$

$$L(a)a = e, \quad L(a)b = d, \quad L(a)c = f.$$

于是  $L(a)$  的矩阵表示为

$$L(a) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

即对于左正则表示, 元素  $S$  的表示矩阵第  $R$  列不为零的矩阵元素所在行, 是乘法表  $S$  行  $R$  列的乘积元素标记的行。

通过以上例子, 可以发现正则表示是一个忠实表示 (同构映射), 同时也是一个可约表示, 因为对于群阶  $n > 1$  的有限群, 正则表示为  $n$  维表示, 而  $S_1^2 + S_2^2 + \cdots + S_q^2 = n$  的关系使其不可能为不可约表示。另外, 正则表示的特征标还有以下关系

$$\chi^L(g_\alpha) = \text{tr}L(g_\alpha) = \begin{cases} |G|, & \text{if } g_\alpha = e, \\ 0, & \text{if } g_\alpha \neq e. \end{cases} \quad (2.82)$$

上式对右正则表示也成立。实际上, 正则表示包含了一个群的所有不等价不可约表示, 这将在后面给出证明。

注意到无论是群表示的矩阵元, 还是特征标, 都是一个从群元到数的映射, 我们可将这类映射统称为群函数。

**§ 定义 2.23. 群函数**  $G$  为一个群, 以  $G$  为定义域、以复数域  $\mathbb{C}$  为值域的函数称为群函数: 如  $f(g_\alpha) = x_\alpha \in \mathbb{C}$ 。群函数的例子为群表示矩阵的矩阵元。

除了表示矩阵的矩阵元和特征标, 其实我们还接触过一种群函数, 就是群空间中矢量的坐标。以  $C_3 = \{e, d, f\}$  为例,  $\mathbf{x} = 1e + 2d + 3f$  为群空间  $V_{C_3}$  中一个矢量, 或写成

$$\mathbf{x} = (e, d, f) \begin{pmatrix} 1 \\ 2 \\ 3 \end{pmatrix} = (e, d, f) [\mathbf{x}],$$

对于其中的坐标  $[\mathbf{x}]$  的三个分量  $[\mathbf{x}]_e = 1, [\mathbf{x}]_d = 2, [\mathbf{x}]_f = 3$ , 可认为是将群元  $g_\alpha$  映射为数的群函数。我们可将其记为  $f_{\mathbf{x}}$ , 它满足

$$f_{\mathbf{x}}(e) = 1, f_{\mathbf{x}}(d) = 2, f_{\mathbf{x}}(f) = 3.$$

因此, 群空间中的每个矢量  $\mathbf{x}$ , 都对应一个群函数  $f_{\mathbf{x}}$ , 因此群空间便对应一个群函数空间。对于群空间  $V_{C_3}$ , 它的基矢为

$$\mathbf{e}_1 = (e, d, f) \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}_2 = (e, d, f) \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \mathbf{e}_3 = (e, d, f) \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix},$$

因此, 群空间的三个基矢  $\mathbf{e}_i$  对应群函数空间的三个基矢, 即三个基矢群函数  $f_{g_i}$ , 它们满足

$$f_e(e) = 1, f_e(d) = 0, f_e(f) = 0,$$

$$f_d(e) = 0, f_d(d) = 1, f_d(f) = 0,$$

$$f_f(e) = 0, f_f(d) = 0, f_f(f) = 1.$$

实际上, 基矢群函数满足

$$f_{g_i}(g_j) = \delta_{ij}. \quad (2.83)$$

我们可以更严格地定义群函数空间。

**§ 定义 2.24. 群函数空间** 对  $\forall g_i \in G$ , 定义群函数  $f_{g_i}: G \rightarrow \mathbb{C}$ ,  $f_{g_i}(g_j) = \delta_{ij}$ ,  $i = 1, 2, \dots, n$ , 以此  $n$  个函数为基, 可以构造复数域  $\mathbb{C}$  上的群函数空间  $V(G): V(G) = \{\mathbf{f} = \sum_{i=1}^n a_i f_{g_i}, a_i \in \mathbb{C}\}$ , 并且满足:  $\forall \mathbf{f}_1, \mathbf{f}_2 \in V(G)$ ,

$$1. \mathbf{f}_1 + \mathbf{f}_2 = \sum_{i=1}^n (a_{1i} + a_{2i}) f_{g_i};$$

$$2. b\mathbf{f}_1 = \sum_{i=1}^n (ba_i) f_{g_i}, b \in \mathbb{C}.$$

称  $V(G)$  为群函数线性空间, 简称群函数空间。

显然, 群空间  $V_G$  和群函数空间  $V(G)$  是同构的。我们可以通过引入矢量乘法和内积, 得到群函数代数和群函数内积空间。

**注 1.** 若  $g_i g_j = g_k$ , 规定  $f_{g_i} f_{g_j} = f_{g_i g_j} = f_{g_k}$ , 则群函数代数  $R(G)$  同构于群代数  $R_G$ 。

**证明.** 对于群函数代数中的矢量  $\mathbf{x} = \sum_{g_i} x(g_i) f_{g_i}$ ,  $\mathbf{y} = \sum_{g_j} y(g_j) f_{g_j}$ , 由  $f_{g_i} f_{g_j} = f_{g_i g_j} = f_{g_k}$  有

$$\begin{aligned} \mathbf{xy} &= \sum_{g_i, g_j} x(g_i) y(g_j) f_{g_i} f_{g_j} \\ &= \sum_{g_i, g_j} (x(g_i) y(g_j)) f_{g_i g_j}, \end{aligned}$$

令  $g_i g_j = g_k$ , 有

$$\begin{aligned} \mathbf{xy} &= \sum_{g_i, g_k} (x(g_i) y(g_i^{-1} g_k)) f_{g_k} \\ &= \sum_{g_k} (xy)(g_k) f_{g_k}, \end{aligned}$$

即

$$(xy)(g_k) = \sum_{g_i} x(g_i) y(g_i^{-1} g_k), \quad (2.84)$$

上式与 (2.80) 式相同, 因此在此规定下群函数代数  $R(G)$  同构于群代数  $R_G$ 。□

**注 2.** 定义函数基矢的内积  $(f_{g_i} | f_{g_j}) = (f_{g_j} | f_{g_i}) = \frac{1}{n} \delta_{ij}$ , 则群函数空间成为一个内积空间。

容易验证  $\forall \mathbf{x} = \sum_{g_i} x(g_i) f_{g_i}$ ,  $\mathbf{y} = \sum_{g_j} y(g_j) f_{g_j}$ , 两个群函数矢量的内积为

$$\begin{aligned} (\mathbf{x} | \mathbf{y}) &= \left( \sum_{g_i} x(g_i) f_{g_i} \middle| \sum_{g_j} y(g_j) f_{g_j} \right) \\ &= \sum_{g_i, g_j} x^*(g_i) y(g_j) (f_{g_i} | f_{g_j}) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{g_i, g_j} x^*(g_i) y(g_j) \delta_{ij} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{g_i} x^*(g_i) y(g_i). \end{aligned} \quad (2.85)$$

**推论.** 群函数内积空间的正则表示为酉表示。

证明. 对于左正则表示  $L(g_i)g_j = g_i g_j, L(g_i)f_{g_j} = f_{g_i} f_{g_j}, \forall \mathbf{x}, \mathbf{y} \in R(G),$  有

$$\begin{aligned} (L(g_k)\mathbf{x} | L(g_k)\mathbf{y}) &= \left( \sum_{g_i} x(g_i) f_{g_k} f_{g_i} \mid \sum_{g_j} y(g_j) f_{g_k} f_{g_j} \right) \\ &= \sum_{g_i, g_j} x^*(g_i) y(g_j) (f_{g_k g_i} \mid f_{g_k g_j}), \end{aligned} \tag{2.86}$$

由重排定理知, 当且仅当  $i = j$  时, 有  $g_k g_i = g_k g_j,$  因此  $(f_{g_k g_i} \mid f_{g_k g_j}) = \frac{1}{n} \delta_{ij},$  所以

$$(L(g_k)\mathbf{x} | L(g_k)\mathbf{y}) = \frac{1}{n} \sum_{g_i} x^*(g_i) y(g_i) = (\mathbf{x} | \mathbf{y}). \tag{2.87}$$

同理可证对右正则表示也成立。 □

总结一下, 描述群的代数结构有两种等价的方式, 一种是以群元  $g_i$  的线性组合为矢量所构成的群空间及群代数, 另一种是以基矢群函数  $f_{g_i}(g_j) = \delta_{ij}$  的线性组合为矢量所构成的群函数空间及其代数, 两者具有如图2.2的同构关系。两者的同构关系是群表示理论的核心, 这使得我们可以使用一系列群函数(表示矩阵, 特征标)来刻画群结构对应的代数。

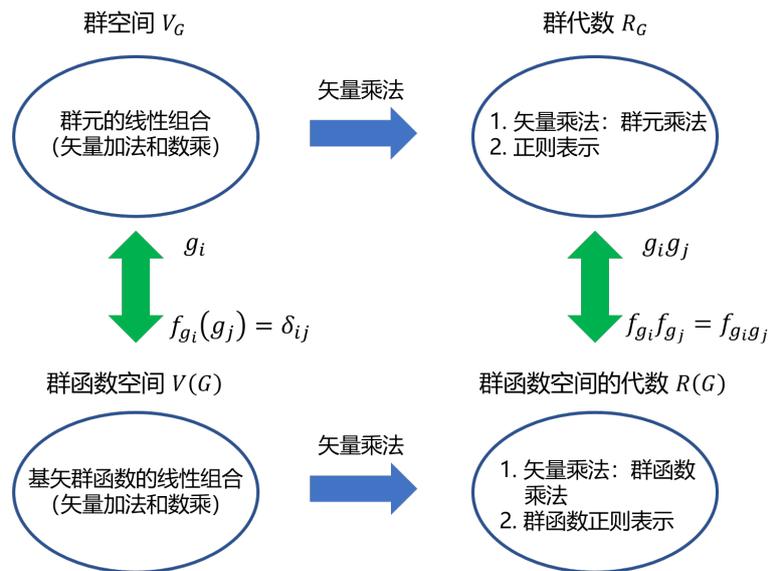


图 2.2: 群空间及群代数与群函数空间及其代数之间的同构关系。

## 2.4 有限群表示理论

在介绍完群表示理论的基础知识后, 我们正式探究有限群的表示理论, 主要内容包括舒尔引理, 正交性定理, 以及 Burnside 定理。需要注意的是, 由于有限群在内积空间的任一表示总等价于一个酉表示, 因此我们只需找到有限群不等价不可约酉表示的性质即可。首先介绍两个舒尔引理。

■ **定理 2.4. 舒尔引理** 一 设  $A$  是群  $G$  在有限维复空间  $V$  上的不可约表示, 若  $V$  上的线性变换  $M$  满足  $MA(g_\alpha) = A(g_\alpha)M$  对  $\forall g_\alpha \in G$  成立, 则  $M = \lambda E,$  其中  $\lambda$  为数域上的数,  $E$  为单位变换。

证明. 我们先证明一个性质: 复线性变换  $M$  至少存在一个非零本征矢, 即总存在  $\mathbf{y} \neq \mathbf{0}$ , 满足  $M\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$ . 因为至少存在一个  $\lambda \in \mathbb{C}$ , 使得  $\det(M - \lambda E) = 0$ , 当得到一个解  $\lambda$  时, 因为  $(M - \lambda E)\mathbf{y} = \mathbf{0}$ , 此时  $\mathbf{y}$  有非零解, 要求  $(M - \lambda E)$  为奇异矩阵. 若记  $M - \lambda E = (\varphi_1, \dots, \varphi_n)$ , 则  $\{\varphi_1, \dots, \varphi_n\}$  是线性相关的, 即存在一组不全为零的复系数  $\{c_1, \dots, c_n\}$ , 使得

$$c_1\varphi_1 + c_2\varphi_2 + \dots + c_n\varphi_n = \mathbf{0}. \quad (2.88)$$

此时取  $\mathbf{y} = (c_1, \dots, c_n)^T$ , 即为  $M\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$  的非零本征矢.

现在我们定义  $V$  的一个子集  $R$ , 满足  $R = \{\mathbf{y} \in V | M\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}\}$ . 对  $\forall \mathbf{y} \in R, g_\alpha \in G$ , 有

$$\begin{aligned} M(A(g_\alpha)\mathbf{y}) &= MA(g_\alpha)\mathbf{y} \\ &= A(g_\alpha)M\mathbf{y} \\ &= A(g_\alpha)\lambda\mathbf{y} \\ &= \lambda(A(g_\alpha)\mathbf{y}), \end{aligned} \quad (2.89)$$

即  $A(g_\alpha)\mathbf{y} \in R$ , 于是  $R$  是  $V$  的  $G$  不变子空间, 且  $R$  必不为零空间. 又因  $A$  是不可约表示,  $V$  没有  $G$  不变的真子空间, 所以  $R = V$ , 即对于  $\forall \mathbf{y} \in V$ , 都有  $M\mathbf{y} = \lambda\mathbf{y}$ , 因此只能有  $M = \lambda E$ .  $\square$

舒尔引理一表明, 与不可约表示任意一个表示矩阵都互易的矩阵必然为常数矩阵, 即对于不可约表示, 一定不存在与所有群元的表示矩阵都对易的非常数矩阵.

**注 1.** *Abel* 群的不可约表示都是互易的, 因此都是一维表示. 该结论也可以从相互对易的酉矩阵可以同时对角化得到.

**注 2.** 若  $A$  是有限群的可约表示, 则存在线性变换  $S$ , 使得  $A'(g_\alpha) = S^{-1}A(g_\alpha)S$  具有分块对角形式, 不妨设

$$A'(g_\alpha) = B_1(g_\alpha) \oplus B_2(g_\alpha),$$

则有  $M = aE_1 \oplus bE_2$ , 满足  $MA'(g_\alpha)M^{-1} = A'(g_\alpha)$ , 此时  $M$  为一些常数矩阵的直和形式.

**定理 2.5. 舒尔引理二** 设群  $G$  在有限维向量空间  $V_A$  与  $V_B$  有不可约表示  $A$  与  $B$ , 若对  $\forall g_\alpha \in G$ , 有将  $V_A$  映入  $V_B$  的线性变换  $M$ , 满足:  $B(g_\alpha)M = MA(g_\alpha)$ , 则:

1. 当表示  $A$  与  $B$  不等价时,  $M \equiv 0$  (为零矩阵);
2. 当  $M$  不为零时,  $A$  与  $B$  必等价.

证明. 由于两个命题互为逆否命题, 只需证明第二个命题即可.

在线性空间  $V_A$  中, 我们作其子空间  $N$ , 其中  $N$  为线性变换  $M$  的零空间  $N = \{\mathbf{x} | M\mathbf{x} = \mathbf{0}\}$ . 则  $N$  是  $G$  不变的, 因为对  $\forall \mathbf{x} \in N, g_\alpha \in G$ ,

$$\begin{aligned} M(A(g_\alpha)\mathbf{x}) &= MA(g_\alpha)\mathbf{x} \\ &= B(g_\alpha)M\mathbf{x} \\ &= \mathbf{0}, \end{aligned} \quad (2.90)$$

即  $A(g_\alpha)\mathbf{x} \in N$ ,  $N$  是  $G$  不变的. 因此  $N$  是  $V_A$  的  $G$  不变子空间. 又因为  $A$  是  $G$  的不可约表示, 因此  $V_A$  没有  $G$  不变的真子空间, 因此  $N$  要么为  $V_A$ , 要么为零空间, 即只包含零矢量.

当  $N = V_A$  时, 即  $\forall \mathbf{x} \in V_A, M\mathbf{x} = \mathbf{0}$ , 因此  $M$  只能为零矩阵, 与题设矛盾。

因此  $N = \{\mathbf{0}\}$ , 这时我们需要证明  $M$  为  $V_A$  和  $V_B$  间的一一映射, 即存在  $M$  的逆变换  $M^{-1}$ 。

1. 证明  $M$  为单射。采用反证法, 假设存在  $\mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V_A, \mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$  但  $M\mathbf{x}_1 = M\mathbf{x}_2$ , 则有  $M(\mathbf{x}_1 - \mathbf{x}_2) = \mathbf{0}$ , 由于  $M$  的零空间  $N = \{\mathbf{0}\}$ , 因此有  $\mathbf{x}_1 = \mathbf{x}_2$ , 与假设矛盾。因此若  $\mathbf{x}_1 \neq \mathbf{x}_2$ , 则  $M\mathbf{x}_1 \neq M\mathbf{x}_2$ ,  $M$  为单射。
2. 证明  $M$  为满射。作  $V_A$  在变换  $M$  下的像集合  $R = \{\mathbf{y} \in V_B | \mathbf{y} = M\mathbf{x}, \forall \mathbf{x} \in V_A\}$ , 对  $\forall \mathbf{y} \in V_B, g_\alpha \in G$ , 有

$$\begin{aligned} B(g_\alpha)\mathbf{y} &= B(g_\alpha)M\mathbf{x} \\ &= MA(g_\alpha)\mathbf{x} \\ &= M\mathbf{x}' \\ &\in R, \end{aligned} \tag{2.91}$$

其中已利用  $V_A$  是  $G$  不变的, 因此  $R$  是  $V_B$  的  $G$  不变子空间。又因为  $B$  为不可约表示, 所以  $R$  要么为  $V_B$ , 要么为零空间。然而若  $R$  为零空间, 则对  $\forall \mathbf{x}_1, \mathbf{x}_2 \in V_A$ , 都有  $M\mathbf{x}_1 = M\mathbf{x}_2 = \mathbf{0}$ , 与  $M$  是单射矛盾。因此  $R = V_B$ , 因此  $M$  为满射。

因此,  $M$  为  $V_A$  到  $V_B$  的一一映射, 为可逆映射, 即  $MA(g_\alpha)M^{-1} = B(g_\alpha)$ , 表示  $A$  与  $B$  等价。此时表示空间  $V_A$  与  $V_B$  的维数相同, 表示矩阵是同阶方阵。□

舒尔引理二表明, 两个不等价不可约表示, 不可能通过一个非零的线性变换  $M$ , 由  $B(g_\alpha)M = MA(g_\alpha)$  联系起来。有了两个舒尔引理, 我们可以证明有限群表示理论的核心定理之一, 正交性定理。

**■ 定理 2.6. 正交性定理** 设有限群  $G = \{g_\alpha\}$  有不等价不可约酉表示  $A^1, A^2, \dots, A^p, \dots, A^r, \dots$ , 其维数分别为:  $S_1, S_2, \dots, S_p, \dots, S_r, \dots$ 。这些不等价不可约酉表示矩阵元, 作为群函数, 在群函数空间这个内积空间有如下性质:

$$(A_{\mu\nu}^p | A_{\mu'\nu'}^r) = \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'},$$

写成求和的形式为

$$\sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^r(g_i) = \frac{n}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}.$$

(为表述方便, 本节将不可约表示的指标  $p$  作为上标。一般而言, 若计算涉及表示矩阵的分量, 则以上标作为不可约表示的指标, 否则以下标作为不可约表示的指标。)

证明. 对于  $S_p$  维不可约酉表示  $A^p$ , 取一  $S_p$  阶矩阵  $D$  (暂不考虑其形式), 构造另一个  $S_p$  阶矩阵  $C$  满足

$$C = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^p(g_i) D A^p(g_i^{-1}), \tag{2.92}$$

对于  $\forall g_j \in G$ , 左乘  $A^p(g_j)$  得

$$\begin{aligned}
A^p(g_j)C &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^p(g_j) A^p(g_i) D A^p(g_i^{-1}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^p(g_j g_i) D A^p(g_i^{-1}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n A^p(g_k) D A^p(g_k^{-1} g_j) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n A^p(g_k) D A^p(g_k^{-1}) A^p(g_j) \\
&= C A^p(g_j)
\end{aligned} \tag{2.93}$$

其中已利用  $g_k = g_j g_i, g_i^{-1} = g_k^{-1} g_j$ . 因此  $C$  与所有  $A^p(g_j)$  可互易, 由舒尔引理一知,  $C = \lambda(D) I_{S_p}$ , 其中  $\lambda(D)$  为与  $D$  有关的常数,  $I_{S_p}$  为  $S_p$  阶单位矩阵. 由于  $C$  的对角形式与  $D$  的具体形式无关, 我们取一个特殊的  $D$  矩阵, 它只有第  $\nu'$  行、第  $\nu$  列的矩阵元为 1, 其他矩阵元为零, 即  $D_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\nu'} \delta_{\beta\nu}$ . 因此由 (2.92) 式得  $C$  的矩阵元为

$$\begin{aligned}
C_{\mu'\mu} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha\beta} A_{\mu'\alpha}^p(g_i) D_{\alpha\beta} A_{\beta\mu}^p(g_i^{-1}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha\beta} A_{\mu'\alpha}^p(g_i) \delta_{\alpha\nu'} \delta_{\beta\nu} A_{\beta\mu}^p(g_i^{-1}) \\
&= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu'\nu'}^p(g_i) A_{\nu\mu}^p(g_i^{-1}).
\end{aligned} \tag{2.94}$$

利用  $A^p$  为酉表示的性质, 即  $A^p(g_i^{-1}) = [A^p(g_i)]^\dagger$ , 即  $A_{\nu\mu}^p(g_i^{-1}) = A_{\mu\nu}^{p*}(g_i)$ , (2.94) 式继而简化为

$$C_{\mu'\mu} = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^p(g_i). \tag{2.95}$$

由于  $C = \lambda(D) I_{S_p}$  为对角矩阵, 应有

$$C_{\mu'\mu} = \lambda(D) \delta_{\mu'\mu}, \tag{2.96}$$

对比即得

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^p(g_i) = \lambda(D) \delta_{\mu'\mu}. \tag{2.97}$$

现在要求  $\lambda(D)$ 。由  $C = \lambda(D) I_{S_p}$  知  $\text{tr}C = S_p \lambda(D)$ , 利用 (2.94) 式有

$$\begin{aligned}
 \lambda(D) &= \frac{1}{S_p} \text{tr}C \\
 &= \frac{1}{S_p} \sum_{\mu} C_{\mu\mu} \\
 &= \frac{1}{S_p} \sum_{\mu} \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu'}^p(g_i) A_{\nu\mu}^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{nS_p} \sum_{i=1}^n \left[ \sum_{\mu} A_{\nu\mu}^p(g_i^{-1}) A_{\mu\nu'}^p(g_i) \right] \\
 &= \frac{1}{nS_p} \sum_{i=1}^n [A^p(g_i^{-1}) A^p(g_i)]_{\nu\nu'} \\
 &= \frac{1}{nS_p} \sum_{i=1}^n [A^p(g_i^{-1}g_i)]_{\nu\nu'}.
 \end{aligned} \tag{2.98}$$

因为  $A^p(g_i^{-1}g_i) = A^p(e)$  为  $S_p$  阶单位矩阵, 所以  $[A^p(g_i^{-1}g_i)]_{\nu\nu'} = \delta_{\nu\nu'}$ , 因此

$$\lambda(D) = \frac{1}{nS_p} \sum_{i=1}^n \delta_{\nu\nu'} = \frac{1}{S_p} \delta_{\nu\nu'}, \tag{2.99}$$

即 (2.97) 式进一步变为

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^p(g_i) = \frac{1}{S_p} \delta_{\nu\nu'} \delta_{\mu\mu'}, \tag{2.100}$$

由此我们得到同一个不可约表示  $A^p$  中矩阵元的正交关系。

现在我们考虑两个不等价的不可约表示  $A^p$  和  $A^r$ , 类似地, 我们构造两个  $S_r \times S_p$  的矩阵  $C', D'$ , 它们满足关系

$$C' = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^r(g_i) D' A^p(g_i^{-1}). \tag{2.101}$$

对  $\forall g_j \in G$ , 左乘  $A^r(g_j)$  有

$$\begin{aligned}
 A^r(g_j) C' &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^r(g_j) A^r(g_i) D' A^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A^r(g_j g_i) D' A^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{k=1}^n A^r(g_k) D' A^p(g_k^{-1}) A^p(g_j) \\
 &= C' A^p(g_j).
 \end{aligned} \tag{2.102}$$

由舒尔引理二知, 对两个不等价的不可约表示, 若对  $\forall g_j \in G$  都满足  $A^r(g_j) C' = C' A^p(g_j)$ , 则  $C'$  必然为

零矩阵。同样地, 取  $D'_{\alpha\beta} = \delta_{\alpha\nu'}\delta_{\beta\nu}$ , 则

$$\begin{aligned}
 C'_{\mu'\mu} &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha\beta} A_{\mu'\alpha}^r(g_i) D'_{\alpha\beta} A_{\beta\mu}^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \sum_{\alpha\beta} A_{\mu'\alpha}^r(g_i) \delta_{\alpha\nu'}\delta_{\beta\nu} A_{\beta\mu}^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu'\nu'}^r(g_i) A_{\nu\mu}^p(g_i^{-1}) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^r(g_i) \\
 &= 0.
 \end{aligned} \tag{2.103}$$

因此, 当  $A^p$  和  $A^r$  为不等价的不可约表示时,  $\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^r(g_i)$  为零, 当两个表示为同一个不可约表示时, 关系由 (2.100) 式给出, 总结而言便是

$$\sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^r(g_i) = \frac{n}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \tag{2.104}$$

或者写成内积形式

$$(A_{\mu\nu}^p | A_{\mu'\nu'}^r) = \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}. \tag{2.105}$$

□

**例 2.20.** 验证  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  不等价不可约表示的正交关系。

我们曾求出  $D_3$  的三个不等价不可约表示为

$D_3$	$e$	$d$	$f$	$a$	$b$	$c$
$A_1$	1	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1	-1
$A_3$	$\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$	$\begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}$

群函数空间的矢量为  $\mathbf{x} = \sum_{i=1}^n x(g_i) f_{g_i}$ , 由三个不等价不可约表示, 我们可以写出 6 个群函数空间的矢量, 即  $A_{\mu\nu}^p = \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^p(g_i) f_{g_i}$ . 取定基矢为  $\{f_e, f_d, f_f, f_a, f_b, f_c\}$ , 可以直接用坐标表示 6 个矢量, 分别为

$$\begin{aligned}
 [A_{11}^1] &= (1, 1, 1, 1, 1, 1), \\
 [A_{11}^2] &= (1, 1, 1, -1, -1, -1), \\
 [A_{11}^3] &= \left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -1, \frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right), \\
 [A_{12}^3] &= \left(0, -\frac{\sqrt{3}}{2}, \frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \\
 [A_{21}^3] &= \left(0, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}, 0, \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{\sqrt{3}}{2}\right), \\
 [A_{22}^3] &= \left(1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, 1, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right).
 \end{aligned}$$

因此, 我们可以验证这一组矢量是正交的, 如

$$\begin{aligned} (A_{12}^3 | A_{11}^2) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^6 A_{12}^{3*}(g_i) A_{11}^2(g_i) \\ &= \frac{1}{6} \left( -\frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} - \frac{\sqrt{3}}{2} + \frac{\sqrt{3}}{2} \right) \\ &= 0, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (A_{12}^3 | A_{12}^3) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^6 A_{12}^{3*}(g_i) A_{12}^3(g_i) \\ &= \frac{1}{6} \left( \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} + \frac{3}{4} \right) \\ &= \frac{1}{2} \\ &= \frac{1}{S_3}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} (A_{11}^2 | A_{11}^2) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^6 A_{11}^{2*}(g_i) A_{11}^2(g_i) \\ &= \frac{1}{6} (1 + 1 + 1 + 1 + 1 + 1) \\ &= 1 \\ &= \frac{1}{S_2}, \end{aligned}$$

同理可验证其他矢量。

因此, 有限群  $G$  的  $S_p$  维不等价不可约酉表示  $A^p$  能给出  $S_p^2$  个群函数空间中的正交矢量, 同时我们知道群函数空间同构于群空间, 群空间的基矢为群元, 因此群函数空间和群空间都是  $n = |G|$  维的线性空间。在定义了内积后, 群函数空间最多只有能  $n$  个完备正交基, 因此有限群  $G$  所有不等价不可约酉表示的维数满足以下关系:

$$\sum_p S_p^2 \leq n. \quad (2.106)$$

需要强调的是正交关系依赖于内积的定义, 因此仅对酉表示成立。

接下来, 我们将证明由不等价不可约酉表示给出的群函数, 不仅是正交的, 而且还是完备的。

**■ 定理 2.7. 完备性定理** 设  $A^p$  ( $p = 1, 2, \dots, q$ ) 是有限群  $G = \{g_\alpha\}$  的所有不等价不可约酉表示, 则  $A^p$  生成的群函数  $A_{\mu\nu}^p(g_i)$  在  $p$  走遍所有不等价不可约酉表示的指标,  $\mu, \nu$  走遍所有行和列的指标时, 在群函数空间是完备的。

证明. 思路是, 我们以所有  $A_{\mu\nu}^p(g_i)$  张成的内积空间作为群表示空间, 证明其对于群函数代数  $R(G)$  的正交补空间是零空间。

我们从不可约酉表示  $A^p$  着手,  $A^p$  在群函数空间中给出  $S_p^2$  个矢量, 即  $A_{\mu\nu}^p = \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^p(g_i) f_{g_i}$  ( $\mu, \nu = 1, \dots, S_p$ ), 其中基矢群函数  $f_{g_i}$  满足  $f_{g_i}(g_j) = \delta_{ij}$ 。我们知道, 在群空间  $V_G$  和群函数空间  $V(G)$  给出的群表示为正则表示, 以右正则表示为例, 它在群空间和群函数空间分别满足

$$R(g_j) g_i = g_i g_j^{-1}, \quad R(g_j) f_{g_i} = f_{g_i} f_{g_j^{-1}} = f_{g_i g_j^{-1}}. \quad (2.107)$$

将  $R(g_j)$  作用于群函数空间的矢量  $A_{\mu\nu}^p$  上, 得到

$$\begin{aligned} R(g_j) A_{\mu\nu}^p &= R(g_j) \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^p(g_i) f_{g_i} \\ &= \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^p(g_i) f_{g_i g_j^{-1}} \\ &= \sum_{k=1}^n A_{\mu\nu}^p(g_k g_j) f_{g_k}, \end{aligned} \quad (2.108)$$

其中已令  $g_i g_j^{-1} = g_k$ ,  $g_i = g_k g_j$ 。利用群表示的性质, 有

$$\begin{aligned} A_{\mu\nu}^p(g_k g_j) &= [A^p(g_k g_j)]_{\mu\nu} \\ &= [A^p(g_k) A^p(g_j)]_{\mu\nu} \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\mu\lambda}^p(g_k) A_{\lambda\nu}^p(g_j), \end{aligned} \quad (2.109)$$

代入 (2.108) 式有

$$\begin{aligned} R(g_j) A_{\mu\nu}^p &= \sum_{k=1}^n \sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\mu\lambda}^p(g_k) A_{\lambda\nu}^p(g_j) f_{g_k} \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\lambda\nu}^p(g_j) \left[ \sum_{k=1}^n A_{\mu\lambda}^p(g_k) f_{g_k} \right] \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_p} A_{\lambda\nu}^p(g_j) A_{\mu\lambda}^p. \end{aligned} \quad (2.110)$$

注意到  $\sum_{k=1}^n A_{\mu\lambda}^p(g_k) f_{g_k} = A_{\mu\lambda}^p$  为第  $\mu$  行、第  $\lambda$  列的矢量, 因此,  $R(g_j)$  的线性变换把第  $\mu$  行、第  $\nu$  列的矢量  $A_{\mu\nu}^p$  变为第  $\mu$  行所有矢量  $\{A_{\mu\lambda}^p | \lambda = 1, \dots, S_p\}$  的线性叠加, 叠加系数为  $A_{\lambda\nu}^p(g_j)$ 。现在我们以第  $\mu$  行的所有正交矢量 (正交性定理) 为基  $\{A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p\}$ , (2.110) 式便是基变换的规则, 即

$$R(g_j) A_{\mu\nu}^p = \left( A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p \right) \begin{pmatrix} A_{1,\nu}^p(g_j) \\ A_{2,\nu}^p(g_j) \\ \vdots \\ A_{S_p,\nu}^p(g_j) \end{pmatrix}, \quad (2.111)$$

所以有

$$\begin{aligned} &R(g_j) \left( A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p \right) \\ &= \left( A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p \right) \begin{pmatrix} A_{1,1}^p(g_j) & A_{1,2}^p(g_j) & \cdots & A_{1,S_p}^p(g_j) \\ A_{2,1}^p(g_j) & A_{2,2}^p(g_j) & \cdots & A_{2,S_p}^p(g_j) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{S_p,1}^p(g_j) & A_{S_p,2}^p(g_j) & \cdots & A_{S_p,S_p}^p(g_j) \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (2.112)$$

因此,  $\{A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p\}$  这  $S_p$  个正交矢量构成的群函数空间  $V(G)$  的一个子空间, 并且这个子空间是右正则表示的  $G$  不变子空间, 并且 (2.112) 表明  $R(g_j)$  在这个子空间的表示矩阵, 恰好是  $A^p(g_j)$  的矩阵本身, 因此称  $\{A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p\}$  承载一个右正则表示。

由于  $A^p$  中每一行的矢量  $\{A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p\}$  都能构成右正则表示的一个  $G$  不变子空间, 因此当  $\mu$  取遍 1 到  $S_p$  时, 一个不可约酉表示  $A^p$  将给出右正则表示的  $S_p$  个  $S_p$  维的  $G$  不变子空间. 又因每一行的矢量都是正交的, 构成的子空间只能有零元素作为公共元素, 因此将此  $S_p$  个子空间做直和后, 依然是右正则表示的  $G$  不变子空间. 现在我们将  $G$  的所有不等价不可约酉表示构成的  $G$  不变子空间再做直和, 称为  $V$ ,  $V$  也是  $G$  不变的. 现在我们需要证明  $V$  就是群函数代数  $R(G)$  本身.

由此, 我们构造  $V$  对  $R(G)$  的正交补空间  $V^\perp$ ,  $R(G) = V \oplus V^\perp$ , 因此  $V^\perp$  也是  $G$  不变的, 需要证明  $V^\perp$  只能包含零矢量. 采用反证法, 假设  $V^\perp$  中包含一个不可约表示  $A^r$ , 基矢为  $\{x_1, x_2, \dots, x_{S_r}\}$ , 它们承载第  $r$  个不等价不可约表示, 其中每一个基矢都在群函数空间中表示为  $x_\alpha = \sum_{i=1}^n x_\alpha(g_i) f_{g_i}$ . 将  $R(g_j)$  作用至  $x_\alpha$  得

$$\begin{aligned} R(g_j) x_\alpha &= \sum_{i=1}^n x_\alpha(g_i) f_{g_i g_j^{-1}} \\ &= \sum_{k=1}^n x_\alpha(g_k g_j) f_{g_k}. \end{aligned} \quad (2.113)$$

由于我们假设  $\{x_1, x_2, \dots, x_{S_r}\}$  承载第  $r$  个不等价不可约表示, 由 (2.110) 式应该有

$$\begin{aligned} R(g_j) x_\alpha &= \sum_{\lambda=1}^{S_r} A_{\lambda\alpha}^r(g_j) x_\lambda \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_r} A_{\lambda\alpha}^r(g_j) \sum_{k=1}^n x_\lambda(g_k) f_{g_k}, \end{aligned} \quad (2.114)$$

对比  $R(g_j) x_\alpha$  两个表达式, 得到

$$x_\alpha(g_k g_j) = \sum_{\lambda=1}^{S_r} A_{\lambda\alpha}^r(g_j) x_\lambda(g_k), \quad (2.115)$$

取  $g_k = g_0$  为单位元有

$$x_\alpha(g_j) = \sum_{\lambda=1}^{S_r} A_{\lambda\alpha}^r(g_j) x_\lambda(g_0). \quad (2.116)$$

然而 (2.116) 式意味着

$$\begin{aligned} x_\alpha &= \sum_{i=1}^n x_\alpha(g_i) f_{g_i} \\ &= \sum_{i=1}^n \sum_{\lambda=1}^{S_r} A_{\lambda\alpha}^r(g_i) x_\lambda(g_0) f_{g_i} \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_r} x_\lambda(g_0) \left[ \sum_{i=1}^n A_{\lambda\alpha}^r(g_i) f_{g_i} \right] \\ &= \sum_{\lambda=1}^{S_r} x_\lambda(g_0) A_{\lambda\alpha}^r, \end{aligned} \quad (2.117)$$

即  $V^\perp$  中的矢量  $x_\alpha$  可用  $V$  中的矢量  $A_{\lambda\alpha}^r$  叠加得到, 与  $V^\perp$  是  $V$  的正交补空间矛盾. 因此  $V^\perp$  不可能承载任一不可约表示, 但  $V^\perp$  又是  $G$  不变的, 因此  $V^\perp = \{0\}$ , 即由所有不等价不可约酉表示的正交基张成的线性空间, 是群函数代数  $R(G)$  本身, 所有  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  在群函数空间是完备的.  $\square$

有了正交性和完备性定理, 我们很容易可以证明 Burnside 定理。

■ **定理 2.8. Burnside 定理** 有限群的所有不等价不可约酉表示维数的平方和等于群的阶。

证明. 由完备性定理知所有  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  在群函数空间是正交且完备的, 一个  $S_p$  维的不等价不可约酉表示  $A^p$  将给出  $S_p^2$  个矩阵元作为群函数, 而群函数空间作为内积空间最多只能有  $n = |G|$  个正交完备基, 因此有

$$\sum_p S_p^2 = n. \quad (2.118)$$

□

**注.** Burnside 定理也能有另一种理解。我们在完备性定理的证明中, 展示了不等价不可约酉表示  $A^p$  第  $\mu$  行所有的正交矢量  $\{A_{\mu,1}^p, A_{\mu,2}^p, \dots, A_{\mu,S_p}^p\}$  在群函数空间承载一个右正则表示, 且 (2.112) 式表明该右正则表示是  $A^p$  本身, 而当  $\mu$  从 1 取至  $S_p$  时, 则承载了  $S_p$  个  $A^p$  表示。而正交性定理告诉我们由  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  张成的子空间的基都是彼此正交的, 因此右正则表示存在直和分解

$$R(g_i) = \sum_p \oplus S_p A^p(g_i), \quad (2.119)$$

即右正则表示包含有限群所有的不等价不可约酉表示  $A^p$ , 重复度为酉表示  $A^p$  的维数  $S_p$ 。对比等号两边表示空间的维数也能直接得到 Burnside 定理。

## 2.5 特征标理论

至此, 我们得到有限群表示理论最重要的三个定理。然而与之前的讨论类似, 虽然所有不等价不可约酉表示的矩阵元  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  构成群函数空间的一组正交完备基并蕴含了有限群表示的所有信息, 但求出所有表示矩阵是很繁琐的, 而且相似变换也导致基的取定并不唯一。而在实际的应用上, 通常简单的分析并不需要知道所有矩阵元的信息, 于是更偏向采用特征标描述不等价不可约表示, 而且相似变换不会改变特征标。

我们曾定义过特征标。

§ **定义 1.14. 特征标** 设  $A = \{A(g_\alpha)\}$  是群  $G = \{g_\alpha\}$  的一个表示, 这个表示的特征标定义为  $\{\chi(g_\alpha)\}$ , 其中

$$\chi(g_\alpha) = \text{tr} A(g_\alpha) = \sum_{\mu} A_{\mu\mu}(g_\alpha).$$

因为共轭元素的特征标相同, 因此特征标属于一类特殊的群函数, 即类函数, 它们将群  $G$  的类映射成数。

特征标函数作为群函数, 在群函数空间也满足类似的正交性。

■ **定理 2.9. 特征标第一定理** 有限群不可约表示的特征标满足:

$$(\chi^p | \chi^r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{p*}(g_i) \chi^r(g_i) = \delta_{pr}.$$

证明. 注意这里并不要求酉表示, 因为有限群的不可约表示都有等价的酉表示, 而等价表示的特征标相同。我们可以先用酉表示的性质证明, 则与这两个酉表示等价的群表示的特征标也满足这个正交关系。

对于两个不等价不可约酉表示, 有

$$\frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\nu'}^r(g_i) = \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}, \quad (2.120)$$

因此有

$$\begin{aligned} (\chi^p | \chi^r) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{p*}(g_i) \chi^r(g_i) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \left[ \sum_{\mu=1}^{S_p} A_{\mu\mu}^{p*}(g_i) \right] \left[ \sum_{\mu'=1}^{S_r} A_{\mu'\mu'}^r(g_i) \right] \\ &= \sum_{\mu=1}^{S_p} \sum_{\mu'=1}^{S_r} \left[ \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n A_{\mu\mu}^{p*}(g_i) A_{\mu'\mu'}^r(g_i) \right] \\ &= \sum_{\mu=1}^{S_p} \sum_{\mu'=1}^{S_r} \left( \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \right) \\ &= \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \sum_{\mu=1}^{S_p} 1 \\ &= \delta_{pr}. \end{aligned} \quad (2.121)$$

由于特征标只是类的函数, 正交关系也能写为

$$(\chi^p | \chi^r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^q n_i \chi^{p*}(K_i) \chi^r(K_i) = \delta_{pr}, \quad (2.122)$$

其中  $n_i$  表示第  $i$  个类  $K_i$  中的群元个数, 一共有  $q$  个类。 □

**注 1.** 不可约表示与其自身的特征标内积为 1, 即  $(\chi^p | \chi^p) = 1$ 。

**注 2.** 可约表示与不可约表示内积给出这个不可约表示在可约表示中的重复度。

证明. 一个可约表示  $A$  总能写成有限群所有不等价不可约表示的直和形式, 即

$$A = \sum_p \oplus m_p A^p, \quad (2.123)$$

其中  $m_p$  称为不等价不可约表示  $A^p$  的重复度。由特征标第一定理有

$$(A | A^r) = \left( \sum_p \oplus m_p A^p | A^r \right) = \sum_p m_p (A^p | A^r) = m_r. \quad (2.124)$$

□

**注 3.** 可约表示与其自身的特征标内积大于 1。

证明. 对于可约表示  $A = \sum_p \oplus m_p A^p$ , 有

$$(A | A) = \left( \sum_p \oplus m_p A^p | \sum_r \oplus m_r A^r \right) = \sum_p m_p^2 > 1. \quad (2.125)$$

□

**注 4.** 群  $G$  的正则表示与  $G$  的任一不可约表示的内积为该不可约表示的维度。

证明. 因为正则表示的特征标有性质

$$\chi^{L/R}(g_i) = \begin{cases} n, & \text{if } g_i = e, \\ 0, & \text{if } g_i \neq e, \end{cases}$$

所以与不等价不可约表示的内积为

$$\begin{aligned} (\chi^{L/R} | \chi^p) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{L/R^*}(g_i) \chi^p(g_i) \\ &= \frac{1}{n} \chi^{L/R^*}(e) \chi^p(e) \\ &= \frac{1}{n} n S_p \\ &= S_p. \end{aligned} \quad (2.126)$$

即正则表示存在直和分解  $L/R = \sum_p \oplus S_p A^p$ , Burnside 定理成立, 联合正交性定理亦可证明完备性定理。□

若知道了某个表示的特征标, 则可求出每个不等价不可约表示在该表示的约化中的重复度。因此, 若两个表示的特征标相同, 则两个表示的约化中每个不等价不可约表示出现的次数都相同, 因此必然相似于相同的分块对角形式, 即这两个表示等价。反之, 等价表示的特征标相同。

**注 5.** 两个表示等价的充要条件是每个元素在两个表示中的特征标对应相等。

特征标函数除了正交性外, 还具有完备性, 但是在类函数空间的完备性。群函数是从群元  $g_i$  到数  $c$  的映射, 构成群函数空间; 与之相应的, 类函数是从群的类  $K_i$  到数  $c$  的映射, 构成类函数空间。群函数空间的维数是群阶  $|G| = n$ , 而类函数空间的维数则是类的个数  $n_c$ 。

■ **定理 2.10.** 有限群的所有不等价不可约表示的特征标在类函数空间是完备的。

证明. 可以利用所有不等价不可约表示的矩阵元  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  在群函数空间是完备的来证明。因为  $\{A_{\mu\nu}^p\}$  是完备的, 任意群函数都能表示为

$$f(g_i) = \sum_{p\mu\nu} a_{\mu\nu}^p A_{\mu\nu}^p(g_i), \quad (2.127)$$

其中  $a_{\mu\nu}^p$  为展开系数。现在我们考虑类函数, 类函数需要满足共轭元素给出相同的函数值, 即  $\forall g_i, g_j \in G$ ,  $f(g_i) = f(g_j^{-1}g_i g_j)$ 。因此, 可以将  $f(g_i)$  改写为

$$f(g_i) = \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n f(g_j^{-1}g_i g_j). \quad (2.128)$$

将 (2.127) 式代入得

$$\begin{aligned} f(g_i) &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{p\mu\nu} a_{\mu\nu}^p A_{\mu\nu}^p(g_j^{-1}g_i g_j) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n \sum_{p\mu\nu} \sum_{\lambda\sigma} a_{\mu\nu}^p A_{\mu\lambda}^p(g_j^{-1}) A_{\lambda\sigma}^p(g_i) A_{\sigma\nu}^p(g_j) \\ &= \sum_{p\mu\nu} \sum_{\lambda\sigma} a_{\mu\nu}^p A_{\lambda\sigma}^p(g_i) \left[ \frac{1}{n} \sum_{j=1}^n A_{\lambda\mu}^{p*}(g_j) A_{\sigma\nu}^p(g_j) \right]. \end{aligned} \quad (2.129)$$

利用正交性定理  $\frac{1}{n} \sum_{j=1}^n A_{\mu\nu}^{p*}(g_j) A_{\mu'\nu'}^r(g_j) = \frac{1}{S_p} \delta_{pr} \delta_{\mu\mu'} \delta_{\nu\nu'}$  有

$$\begin{aligned} f(g_i) &= \sum_{p\mu\nu} \sum_{\lambda\sigma} a_{\mu\nu}^p A_{\lambda\sigma}^p(g_i) \frac{1}{S_p} \delta_{\lambda\sigma} \delta_{\mu\nu} \\ &= \sum_p \left[ \frac{1}{S_p} \sum_{\mu} a_{\mu\mu}^p \right] \left[ \sum_{\lambda} A_{\lambda\lambda}^p(g_i) \right] \\ &= \sum_p b^p \chi^p(g_i), \end{aligned} \tag{2.130}$$

即有限群任意一个类函数  $f(g_i)$  都能用不等价不可约表示的特征标展开，即特征标  $\chi^p$  作为类函数空间的向量，在类函数空间是完备的。□

由于有限群类函数空间的维数等于类的个数，而特征标在类函数空间又是正交且完备的，因此有以下推论。

**推论.** 一个群的不等价不可约表示的个数等于群中类的个数。

因此，若有限群有  $q$  个类，其不等价不可约表示的特征标构成一个  $q \times q$  的表格。

§ 定义 2.25. 特征标表 把有限群  $G$  的所有不等价不可约表示的特征标，作为类函数给出一个表，称为  $G$  的特征标表。表中的行为一个不可约表示中不同类的特征标，列为群的一个类  $K_i$  在各不等价不可约表示中的特征标，具有如下形式：

	$n_1 \{K_1\}$	$n_2 \{K_2\}$	$\cdots$	$n_q \{K_q\}$
$A_1$	$\chi^1(K_1)$	$\chi^1(K_2)$	$\cdots$	$\chi^1(K_q)$
$A_2$	$\chi^2(K_1)$	$\chi^2(K_2)$	$\cdots$	$\chi^2(K_q)$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\ddots$	$\vdots$
$A_q$	$\chi^q(K_1)$	$\chi^q(K_2)$	$\cdots$	$\chi^q(K_q)$

$n_i$  表示第  $i$  个类  $K_i$  中群元的个数。

因此，特征标第一定理指出特征标表的任意两行满足正交关系  $(\chi^p | \chi^r) = \frac{1}{n} \sum_{i=1}^q n_i \chi^{p*}(K_i) \chi^r(K_i) = \delta_{pr}$ 。

**例 2.21.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的特征标表。

$D_3$  群有三个类，分别为  $K_1 = \{e\}$ ,  $K_2 = \{d, f\}$ , 及  $K_3 = \{a, b, c\}$ ，因此有三个不等价不可约表示，由 Burnside 定理  $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 = 6$  知存在两个 1 维表示和一个 2 维表示。两个 1 维表示分别为恒等表示  $A_1$  和非恒等表示  $A_2$ ，非恒等表示  $A_2$  可由  $D_3/C_3 \cong C_2$  得出，即

$D_3$	$1 \{e\}$	$2 \{d\}$	$3 \{a\}$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$A_3$	$\chi^3(K_1)$	$\chi^3(K_2)$	$\chi^3(K_3)$

对于剩下的 2 维表示  $A_3$ , 可用特征标第一定理求出. 首先单位元的特征标为维数, 即  $\chi^3(K_1) = 2$ , 剩余  $\chi^3(K_2)$  和  $\chi^3(K_3)$ , 利用两个正交关系有

$$\begin{aligned}(\chi^3|\chi^1) &= \frac{1}{6} (2 + 2\chi^3(K_2) + 3\chi^3(K_3)) = 0, \\(\chi^3|\chi^2) &= \frac{1}{6} (2 + 2\chi^3(K_2) - 3\chi^3(K_3)) = 0,\end{aligned}$$

因而求出  $\chi^3(K_2) = -1$ ,  $\chi^3(K_3) = 0$ .  $D_3$  的特征标表为

$D_3$	1 {e}	2 {d}	3 {a}
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$A_3$	2	-1	0

与之前利用  $\mathbb{R}^2$  求出表示矩阵再求特征标的结果一致.

实际上, 特征标表除了任意两行之间满足正交关系, 任意两列之间也存在正交关系.

■ **定理 2.11. 特征标第二定理** 有限群  $G$  有类  $K_1, K_2, \dots, K_q$ ,  $n_i$  为第  $i$  个类的元素个数, 则有:

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^q n_i \chi^{p*}(K_i) \chi^p(K_j) = \delta_{ij}.$$

证明. 注意到特征标表是  $q \times q$  的表格,  $q$  为有限群类的个数, 我们可以定义一个  $q \times q$  的矩阵  $F$ , 它的矩阵元为

$$F_{ri} = \sqrt{\frac{n_i}{n}} \chi^r(K_i), \quad (2.131)$$

其共轭转置为

$$F_{ip}^\dagger = F_{pi}^* = \sqrt{\frac{n_i}{n}} \chi^{p*}(K_i). \quad (2.132)$$

因此特征标第一定理可以表示为

$$\begin{aligned}(FF^\dagger)_{rp} &= \sum_{i=1}^q F_{ri} F_{ip}^\dagger \\&= \sum_{i=1}^q F_{ri} F_{pi}^* \\&= \frac{n_i}{n} \sum_{i=1}^q \chi^{p*}(K_i) \chi^r(K_i) \\&= \delta_{pr},\end{aligned} \quad (2.133)$$

所以  $FF^\dagger = I_q$  是  $q$  阶单位矩阵. 矩阵  $F$  的所有行  $\{\chi^r\}$  是类函数空间的正交完备基, 即  $F$  的所有行向量

线性无关, 因此矩阵  $F$  是可逆的, 且  $F^{-1} = F^\dagger$ . 因此有  $F^\dagger F = I_q$ , 写成矩阵元形式为

$$\begin{aligned} (F^\dagger F)_{ij} &= \sum_{p=1}^q F_{ip}^\dagger F_{pj} \\ &= \sum_{p=1}^q F_{pi}^* F_{pj} \\ &= \frac{1}{n} \sum_{p=1}^q \sqrt{n_i n_j} \chi^{p*}(K_i) \chi^p(K_j) \\ &= \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (2.134)$$

由于仅有  $i = j$  时才不为零, 可进一步写为

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^q n_i \chi^{p*}(K_i) \chi^p(K_j) = \delta_{ij}. \quad (2.135)$$

□

由于  $n$  维线性空间中, 相互正交的向量个数必不大于  $n$ , 结合特征标第一定理与第二定理, 也可推出不等价不可约表示在类空间的完备性。

**例 2.22.** 求  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的 2 维不等价不可约表示的特征标。

类似地, 容易求出  $D_3$  的两个 1 维表示, 对于 2 维表示  $A_3$  也有  $A_3(e) = 2$ ,

$D_3$	1 {e}	2 {d}	3 {a}
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$A_3$	2	$\chi^3(K_2)$	$\chi^3(K_3)$

利用特征标第二定理有

$$\begin{aligned} \frac{1}{n} \sum_{p=1}^q n_i \chi^{p*}(K_1) \chi^p(K_2) &= \frac{1}{6} (1 + 1 + 2\chi^3(K_2)) = 0, \\ \frac{1}{n} \sum_{p=1}^q n_i \chi^{p*}(K_1) \chi^p(K_3) &= \frac{1}{6} (1 - 1 + 2\chi^3(K_3)) = 0, \end{aligned}$$

求出  $\chi^3(K_2) = -1$ ,  $\chi^3(K_3) = 0$ 。

## 2.6 新表示的构成

我们知道群的表示总能被分解成最基本的不等价不可约表示, 如何利用这些基本的表示来构造群更多的、维数更大的表示, 是这一节的主要内容。

通过之前的学习, 我们知道两个表示的直和  $A \oplus B$  能构成群  $G$  的一个更高维的表示。除了直和外, 矩阵一般还有直积这种扩张方式。一个  $n \times n$  的矩阵  $A = (a_{ik})$  和  $m \times m$  的矩阵  $B = (b_{jl})$ , 定义二者的直积为  $C = A \otimes B$ , 矩阵元为  $C_{ij,kl} = (a_{ik} b_{jl})$ ,  $C$  是一个  $(nm) \times (nm)$  的矩阵。直观而言,  $C$  可写成分块矩阵形式

$$C = \begin{pmatrix} a_{11}B & a_{12}B & \cdots & a_{1n}B \\ a_{21}B & a_{22}B & \cdots & a_{2n}B \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{n1}B & a_{n2}B & \cdots & a_{nn}B \end{pmatrix}.$$

矩阵的直积满足以下性质:

1. 两个单位矩阵的直积是单位矩阵;
2. 两个对角矩阵的直积是对角矩阵;
3. 两个酉矩阵的直积是酉矩阵;
4. 若  $A$  与  $B$  是阶相同的矩阵,  $X$  与  $Y$  是阶相同的矩阵, 则

$$(A \otimes X)(B \otimes Y) = (AB) \otimes (XY).$$

可以先证明第 4 点。因为  $A \otimes X$  和  $B \otimes Y$  都是  $nm \times nm$  矩阵, 所以其乘积也是  $nm \times nm$  矩阵, 其行指标  $\alpha$  和列指标  $\beta$  可写为  $\alpha = ij, \beta = kl$ , 其中  $i, k = 1, \dots, n, j, l = 1, \dots, m$ 。所以有

$$\begin{aligned} [(A \otimes X)(B \otimes Y)]_{\alpha, \beta} &= \sum_{\gamma=1}^{nm} (A \otimes X)_{\alpha, \gamma} (B \otimes Y)_{\gamma, \beta} \\ &= \sum_{p=1}^n \sum_{q=1}^m (A \otimes X)_{ij, pq} (B \otimes Y)_{pq, kl}, \end{aligned}$$

由直积定义有

$$(A \otimes X)_{ij, pq} = A_{ip} X_{jq}, \quad (B \otimes Y)_{pq, kl} = B_{pk} Y_{ql},$$

因此

$$\begin{aligned} [(A \otimes X)(B \otimes Y)]_{ij, kl} &= \left( \sum_{p=1}^n A_{ip} B_{pk} \right) \left( \sum_{q=1}^m X_{jq} Y_{ql} \right) \\ &= (AB)_{ik} (XY)_{jl} \\ &= [(AB) \otimes (XY)]_{ij, kl}, \end{aligned}$$

于是有

$$(A \otimes X)(B \otimes Y) = (AB) \otimes (XY).$$

若  $A$  和  $B$  都是酉矩阵, 即  $AA^\dagger = I_n, BB^\dagger = I_m$ , 则

$$(A \otimes B)(A^\dagger \otimes B^\dagger) = (AA^\dagger) \otimes (BB^\dagger) = I_n \otimes I_m = I_{nm} = (A^\dagger \otimes B^\dagger)(A \otimes B).$$

因此  $A \otimes B$  也是酉矩阵。

由矩阵的直积可以定义群表示的直积。

**定理 2.12. 群表示的直积** 群  $G$  有两个表示  $A$  与  $B$ , 作表示矩阵的直积  $C(g_\alpha) = A(g_\alpha) \otimes B(g_\alpha)$ , 这个直积矩阵群  $C$  保持群的乘法规律不变, 也是群  $G$  的一个表示。这个表示称为  $A$  表示与  $B$  表示的直积表示。

$$C(g_\alpha) = A(g_\alpha) \otimes B(g_\alpha) = \begin{pmatrix} A_{11}(g_\alpha)B(g_\alpha) & A_{12}(g_\alpha)B(g_\alpha) & \cdots & A_{1n}(g_\alpha)B(g_\alpha) \\ A_{21}(g_\alpha)B(g_\alpha) & A_{22}(g_\alpha)B(g_\alpha) & \cdots & A_{2n}(g_\alpha)B(g_\alpha) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ A_{n1}(g_\alpha)B(g_\alpha) & A_{n2}(g_\alpha)B(g_\alpha) & \cdots & A_{nn}(g_\alpha)B(g_\alpha) \end{pmatrix}.$$

证明. 可以验证矩阵直积是保持群乘法不变的, 因为  $\forall g_\alpha, g_\beta \in G$ ,

$$\begin{aligned} C(g_\alpha)C(g_\beta) &= [A(g_\alpha) \otimes B(g_\alpha)][A(g_\beta) \otimes B(g_\beta)] \\ &= [A(g_\alpha)A(g_\beta)] \otimes [B(g_\alpha)B(g_\beta)] \\ &= A(g_\alpha g_\beta) \otimes B(g_\alpha g_\beta) \\ &= C(g_\alpha g_\beta). \end{aligned} \quad (2.136)$$

因此两个表示的直积依然是群的一个表示。  $\square$

通常而言直积表示会给出更高维的表示 (1 维表示的直积除外), 因此更有可能给出可约的表示。我们可用特征标判断直积表示是否为可约表示。直积表示的特征标为

$$\begin{aligned} \chi^C(g_i) &= \text{tr}C(g_i) \\ &= \text{tr}[A(g_i) \otimes B(g_i)] \\ &= \text{tr}A(g_i)\text{tr}B(g_i) \\ &= \chi^A(g_i)\chi^B(g_i), \end{aligned} \quad (2.137)$$

其中已利用  $\text{tr}(A \otimes B) = \sum_{ij} (A \otimes B)_{ij,ij} = \sum_{ij} A_{ii}B_{jj} = \text{tr}A\text{tr}B$ 。直积表示特征标自身的内积为

$$\begin{aligned} (\chi^C|\chi^C) &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{C*}(g_i)\chi^C(g_i) \\ &= \frac{1}{n} \sum_{i=1}^n \chi^{A*}(g_i)\chi^{B*}(g_i)\chi^A(g_i)\chi^B(g_i). \end{aligned} \quad (2.138)$$

一般而言  $(\chi^C|\chi^C)$  是大于 1 的。通常两个不可约表示的直积若仍为不可约表示, 需要其中一个不可约表示, 如  $B$  为 1 维表示, 并且满足  $\chi^{B*}(g_i)\chi^B(g_i) = 1$  对所有  $g_i$  成立。另外, 由  $\chi^C(g_i) = \chi^A(g_i)\chi^B(g_i)$  知,  $A \otimes B$  和  $B \otimes A$  给出的两个直积表示是等价表示, 因为特征标是一样的。

**例 2.23.**  $D_3$  群不等价不可约表示间直积给出的表示。

写出  $D_3$  群的特征标表后, 容易求出不等价不可约表示的直积表示的特征标为

$\chi$	1 {e}	2 {d}	3 {a}	
$A_1 \otimes A_1$	1	1	1	$A_1$
$A_2 \otimes A_2$	1	1	1	$A_1$
$A_3 \otimes A_3$	4	1	0	$A_1 \oplus A_2 \oplus A_3$
$A_1 \otimes A_2$	1	1	-1	$A_2$
$A_1 \otimes A_3$	2	-1	0	$A_3$
$A_2 \otimes A_3$	2	-1	0	$A_3$

将不同的直积表示和所有不等价不可约表示做内积, 求出重复度, 即可对直积表示进行直和分解, 如

$$A_3 \otimes A_3 = A_1 \oplus A_2 \oplus A_3,$$

等号左边是两个 2 维表示的直积, 因此是 4 维表示, 等号右边是两个 1 维表示和一个 2 维表示的直和, 因此也是 4 维表示。设承载  $A_3$  表示的表示空间为  $V_3$ , 直积  $V_3 \otimes V_3$  后得到的表示空间, 能同时承载  $D_3$  的所有不等价不可约表示各一次。

以上的直积表示是在同一个群中利用低维数的表示构造高维数的表示。我们曾在第一章提及过群直积的概念，即由两个小阶数的群构造大阶数群的做法，如  $C_2 \otimes C_3 = C_6$ 。一个直接的想法是，若我们已知小阶数群如  $C_2, C_3$  群的表示，是否能直接得到直积群如  $C_6$  的表示？答案是肯定的。

■ **定理 2.13. 直积群的表示** 设群  $G = G_1 \otimes G_2$  是群  $G_1, G_2$  的直积， $A$  与  $B$  分别是  $G_1$  与  $G_2$  的表示，令  $C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})$ ，则  $C$  构成直积群  $G$  的一个表示。

证明. 只需证明表示  $C$  的定义保持群乘法不变即可。对  $\forall g_{1\alpha}, g_{1\alpha'} \in G_1, \forall g_{2\beta}, g_{2\beta'} \in G_2$ ，有

$$\begin{aligned} C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) C(g_{1\alpha'}, g_{2\beta'}) &= [A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})] [A(g_{1\alpha'}) \otimes B(g_{2\beta'})] \\ &= [A(g_{1\alpha}) A(g_{1\alpha'})] \otimes [B(g_{2\beta}) B(g_{2\beta'})] \\ &= A(g_{1\alpha} g_{1\alpha'}) \otimes B(g_{2\beta} g_{2\beta'}) \\ &= C(g_{1\alpha} g_{1\alpha'}, g_{2\beta} g_{2\beta'}), \end{aligned} \quad (2.139)$$

因此  $C$  构成直积群  $G = G_1 \otimes G_2$  的一个表示。 □

**推论 1.** 若  $G = G_1 \otimes G_2$ ，且  $A$  与  $B$  分别是  $G_1$  与  $G_2$  的不可约表示，则  $C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})$  是  $G$  的不可约表示。

证明. 记  $|G_1| = m, |G_2| = n$ ，则  $|G| = mn$ 。在  $G$  中，表示  $C$  的特征标为

$$\chi^C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = \text{tr}(A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})) = \chi^A(g_{1\alpha}) \chi^B(g_{2\beta}), \quad (2.140)$$

其中  $\chi^A(g_{1\alpha})$  为表示  $A$  在  $G_1$  中的特征标， $\chi^B(g_{2\beta})$  为表示  $B$  在  $G_2$  中的特征标。在  $G$  中，表示  $C$  与自身的内积为

$$\begin{aligned} (\chi^C | \chi^C) &= \frac{1}{mn} \sum_{\alpha=1}^m \sum_{\beta=1}^n \chi^{A*}(g_{1\alpha}) \chi^{B*}(g_{2\beta}) \chi^A(g_{1\alpha}) \chi^B(g_{2\beta}) \\ &= \left[ \frac{1}{m} \sum_{\alpha=1}^m \chi^{A*}(g_{1\alpha}) \chi^A(g_{1\alpha}) \right] \left[ \frac{1}{n} \sum_{\beta=1}^n \chi^{B*}(g_{2\beta}) \chi^B(g_{2\beta}) \right] \\ &= (\chi^A | \chi^A) (\chi^B | \chi^B) \\ &= 1, \end{aligned} \quad (2.141)$$

因此若  $G = G_1 \otimes G_2$ ， $G_1$  与  $G_2$  的不可约表示通过  $C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})$  给出的表示在  $G$  中是不可约的。 □

**推论 2.** 当  $A$  与  $B$  分别取遍  $G_1$  与  $G_2$  的所有不等价不可约表示时， $C(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = A(g_{1\alpha}) \otimes B(g_{2\beta})$  给出  $G = G_1 \otimes G_2$  所有的不等价不可约表示。

证明. 记  $|G_1| = m, |G_2| = n$ ，若  $A_1, \dots, A_{q_1}$  为  $G_1$  的所有不等价不可约表示， $B_1, \dots, B_{q_2}$  为  $G_2$  的所有不等价不可约表示，对应的维数分别为  $S^{A_i}$  和  $S^{B_j}$ ，由 Burnside 定理有

$$\sum_{i=1}^{q_1} (S^{A_i})^2 = m, \quad \sum_{j=1}^{q_2} (S^{B_j})^2 = n. \quad (2.142)$$

给定  $A_i$  和  $B_j$ , 通过  $C_{ij}(g_{1\alpha}, g_{2\beta}) = A_i(g_{1\alpha}) \otimes B_j(g_{2\beta})$  构造的  $S^{A_i} S^{B_j}$  维表示是  $G = G_1 \otimes G_2$  的不可约表示, 而且不同的  $(A_i, B_j)$  将给出不等价的不可约表示  $C_{ij}$ , 因为

$$(\chi^{C_{ij}} | \chi^{C_{kl}}) = (\chi^{A_i} | \chi^{A_k}) (\chi^{B_j} | \chi^{B_l}) = \delta_{ik} \delta_{jl}. \quad (2.143)$$

因此, 当  $A_i$  和  $B_j$  取遍所有不等价不可约表示时, 给出不等价不可约表示  $C_{ij}$  维数  $S^{C_{ij}}$  的平方和为

$$\sum_{ij} (S^{C_{ij}})^2 = \sum_{ij} (S^{A_i} S^{B_j})^2 = \sum_{i=1}^{q_1} (S^{A_i})^2 \sum_{j=1}^{q_2} (S^{B_j})^2 = mn = |G|, \quad (2.144)$$

已满足 Burnside 定理, 即已给出  $G$  的所有不等价不可约表示。□

直积群的不等价不可约表示能如此简单地确定, 得益于直积群很强的结构, 可以通过其直积因子的不可约表示构造所有不等价不可约表示。对于一般的群  $G$  而言, 可以通过其子群  $H < G$  的群表示来构造群  $G$  的表示, 称作诱导表示。

**§ 定义 2.26. 群的诱导表示** 设群  $G$  有子群  $H$ , 则有子群的表示  $B$  诱导出的群  $G$  的表示称为诱导表示。诱导表示  ${}_H U^B$  的构造方式如下: 将群  $G$  作右陪集分割  $Hg_1, Hg_2, \dots, Hg_l$ , 设子群  $H$  的表示  $B$  的维数为  $d$ , 定义映射如下:  $\forall g \in G$ ,

$$\sigma(g) = \begin{cases} B(g), & \text{if } g \in H \text{ (} d \times d \text{ 矩阵),} \\ 0, & \text{if } g \notin H \text{ (} d \times d \text{ 零矩阵),} \end{cases}$$

利用映射  $\sigma$  可构造由子群  $H$  的表示  $B$  诱导的群  $G$  的表示  ${}_H U^B$ :  $\forall g \in G$ ,  ${}_H U^B(g)$  为  $ld$  维表示矩阵, 其中  $l = |G|/|H|$  为子群  $H$  的指数, 矩阵元为  $[{}_H U^B(g)]_{ij} = \sigma(g_i g g_j^{-1})$ ,  $g_i, g_j$  为陪集代表元。写成  $ld \times ld$  的矩阵形式为

$${}_H U^B(g) = \begin{pmatrix} \sigma(g_1 g g_1^{-1}) & \sigma(g_1 g g_2^{-1}) & \cdots & \sigma(g_1 g g_l^{-1}) \\ \sigma(g_2 g g_1^{-1}) & \sigma(g_2 g g_2^{-1}) & \cdots & \sigma(g_2 g g_l^{-1}) \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ \sigma(g_l g g_1^{-1}) & \sigma(g_l g g_2^{-1}) & \cdots & \sigma(g_l g g_l^{-1}) \end{pmatrix}.$$

诱导表示的定义比较复杂, 我们先给出  ${}_H U^B(g)$  满足以下性质。

1.  ${}_H U^B$  把单位元映射为单位矩阵。因为  $[{}_H U^B(e)]_{ij} = \sigma(g_i g_j^{-1})$  ( $i, j = 1, \dots, l$ ), 由于  $g_i, g_j$  为陪集代表元, 当  $i \neq j$  时,  $g_i g_j^{-1} \notin H$ , 因此  $\sigma(g_i g_j^{-1}) = 0$ ; 当  $i = j$  时,  $g_i g_i^{-1} = e \in H$ , 因此  $\sigma(g_i g_i^{-1}) = I_d$  ( $B$  是  $H$  的一个  $d$  维表示), 因此  $[{}_H U^B(e)]_{ij} = I_d \delta_{ij}$ , 即  ${}_H U^B(e) = I_{ld}$ 。
2.  ${}_H U^B$  每一行、每一列有且只有一块不为  $d \times d$  的零矩阵。以第  $i$  行为例, 因为  $Hg_1, Hg_2, \dots, Hg_l$  是群  $G$  的右陪集分割, 对于任意  $g \in G$ ,  $g_i g$  属于且仅属于其中一个陪集  $Hg_j$ , 因此每一行只有一个  $g_i g g_j^{-1} \in H$  使得  $\sigma(g_i g g_j^{-1}) = B(g_i g g_j^{-1})$ , 其余均为零矩阵, 即  ${}_H U^B(g)$  每一行有且只有一块不为  $d \times d$  零矩阵。对于每一列同理可证。
3. 最后再验证  ${}_H U^B$  构成群  $G$  的一个表示。对  $\forall g, g' \in G$ , 考虑  ${}_H U^B(g) {}_H U^B(g')$  的第  $i$  行、第  $j$  列 ( $i, j = 1, \dots, l$ )

$$\begin{aligned}
[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} &= \sum_{k=1}^l [{}_H U^B(g)]_{ik} [{}_H U^B(g')]_{kj} \\
&= \sum_{k=1}^l \sigma(g_i g g_k^{-1}) \sigma(g_k g' g_j^{-1}),
\end{aligned} \tag{2.145}$$

其中求和指标  $k$  取遍  $1, \dots, l$ , 因此第一项  $\sigma(g_i g g_k^{-1})$  取遍  ${}_H U^B(g)$  矩阵第  $i$  行的不同列的块, 而第二项  $\sigma(g_k g' g_j^{-1})$  取遍  ${}_H U^B(g')$  矩阵第  $j$  列的不同行的块。由第 2 点性质知道  ${}_H U^B$  矩阵每一行、每一列有且只有一块不为零矩阵, 设  ${}_H U^B(g)$  矩阵第  $i$  行非零块在第  $m$  列, 而  ${}_H U^B(g')$  矩阵第  $j$  列非零块在第  $n$  行, 即  $g_i g g_m^{-1} \in H$  和  $g_n g' g_j^{-1} \in H$ , 因此

$$\begin{aligned}
[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} &= \sum_{k=1}^l \sigma(g_i g g_k^{-1}) \sigma(g_k g' g_j^{-1}) \\
&= \sum_{k=1}^l B(g_i g g_m^{-1}) \delta_{km} B(g_n g' g_j^{-1}) \delta_{kn} \\
&= B(g_i g g_m^{-1}) B(g_n g' g_j^{-1}) \delta_{mn}.
\end{aligned} \tag{2.146}$$

当  $m = n$  时,  $g_i g g_m^{-1}$  和  $g_m g' g_j^{-1}$  都属于  $H$ , 且  $(g_i g g_m^{-1})(g_m g' g_j^{-1}) = g_i g g' g_j^{-1} \in H$  (子群  $H$  的封闭性), 因而

$$\begin{aligned}
[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} &= B(g_i g g_m^{-1}) B(g_m g' g_j^{-1}) \\
&= B(g_i g g' g_j^{-1}),
\end{aligned} \tag{2.147}$$

其中第二个等号利用了  $B$  是子群  $H$  的表示的性质。当  $m \neq n$  时,  $[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} = 0$ , 此时

$$g_i g g' g_j^{-1} = g_i g g_m^{-1} g_m g' g_j^{-1} \in H g_m g' g_j^{-1}, \tag{2.148}$$

只有当  $g_m g' g_j^{-1} \in H$  时  $g_i g g' g_j^{-1}$  才属于  $H$ , 而  ${}_H U^B(g')$  矩阵的第  $j$  非零块在第  $n$  行, 因此  $\sigma(g_m g' g_j^{-1}) = 0$ , 即  $g_m g' g_j^{-1} \notin H$ , 故  $g_i g g' g_j^{-1} \notin H$ 。总结而言, 矩阵乘积的分量为

$$[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} = \begin{cases} B(g_i g g' g_j^{-1}), & \text{if } g_i g g' g_j^{-1} \in H, \\ 0, & \text{if } g_i g g' g_j^{-1} \notin H. \end{cases} \tag{2.149}$$

根据  ${}_H U^B$  的定义, 上式可写为

$$[{}_H U^B(g) {}_H U^B(g')]_{ij} = \sigma(g_i g g' g_j^{-1}) = [{}_H U^B(g g')]_{ij}, \tag{2.150}$$

因此诱导表示  ${}_H U^B$  保持乘法关系不变, 是群  $G$  的一个表示。

诱导表示的推导较为复杂, 详情可见李新征《群论及其在凝聚态物理中的应用》第二章 2.6 节。

一般而言, 我们关心诱导表示的特征标, 其特征标满足

$$\begin{aligned}
\chi^U(g) &= \sum_{j=1}^l \text{tr} \sigma(g_j g g_j^{-1}) \\
&= \frac{1}{|H|} \sum_{t \in G} \text{tr} \sigma(t g t^{-1}),
\end{aligned} \tag{2.151}$$

其中已将求和取为对所有群元求和, 并除去重复计算部分。

**例 2.24.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  中由  $H = \{e, d, f\}$  的  $B_2$  诱导的表示。  $H$  的特征标表为

$H$	$\{e\}$	$\{d\}$	$\{f\}$
$B_1$	1	1	1
$B_2$	1	$\omega$	$\omega^2$
$B_3$	1	$\omega^2$	$\omega$

其中  $\omega = \exp(i2\pi/3)$ 。

取陪集代表元为  $g_1 = e, g_2 = a$ , 其由  $B_2$  诱导的表示  ${}_{H}U^{B_2}$  是 2 维表示, 有

$${}_{H}U^{B_2}(e) = \begin{pmatrix} \sigma(eee^{-1}) & \sigma(eea^{-1}) \\ \sigma(aee^{-1}) & \sigma(aea^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_2(e) & 0 \\ 0 & B_2(e) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

$${}_{H}U^{B_2}(d) = \begin{pmatrix} \sigma(ed e^{-1}) & \sigma(eda^{-1}) \\ \sigma(ade^{-1}) & \sigma(ada^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_2(d) & 0 \\ 0 & B_2(f) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega^2 \end{pmatrix},$$

$${}_{H}U^{B_2}(f) = \begin{pmatrix} \sigma(efe) & \sigma(efa^{-1}) \\ \sigma(afe^{-1}) & \sigma(afa^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} B_2(f) & 0 \\ 0 & B_2(d) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \omega^2 & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix},$$

$${}_{H}U^{B_2}(a) = \begin{pmatrix} \sigma(eae) & \sigma(eaa^{-1}) \\ \sigma(aae^{-1}) & \sigma(aaa^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & B_2(e) \\ B_2(e) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$${}_{H}U^{B_2}(b) = \begin{pmatrix} \sigma(ebe) & \sigma(eba^{-1}) \\ \sigma(abe^{-1}) & \sigma(aba^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & B_2(f) \\ B_2(d) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \omega^2 \\ \omega & 0 \end{pmatrix},$$

$${}_{H}U^{B_2}(c) = \begin{pmatrix} \sigma(ece) & \sigma(eca^{-1}) \\ \sigma(ace^{-1}) & \sigma(aca^{-1}) \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & B_2(d) \\ B_2(f) & 0 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \omega \\ \omega^2 & 0 \end{pmatrix},$$

对应的特征标为

$\chi$	$\{e\}$	$2\{d\}$	$3\{a\}$
${}_{H}U^{B_2}$	2	-1	0

因此该诱导表示实际为  $D_3$  的 2 维表示  $A_3$ 。

诱导表示是从群  $G$  的一个子群  $H$  的表示构造的群  $G$  的表示, 相反, 当已知群  $G$  的一个表示, 也可以求出其子群相应的表示, 称为分导表示。

**§ 定义 2.27. 群的分导表示**  $A$  是群  $G$  的一个表示, 那么对  $G$  的子群  $H$  中的元素  $\forall h \in H < G$ ,  $\{A(h)\}$  也是  $H$  的一个表示。这样的表示称为  $G$  的表示  $A$ , 到其子群  $H$  的缩小, 或分导表示, 记为  $A|_H$ 。

分导表示比诱导表示简单, 是群表示保持乘法规则不变的结果。

**例 2.25.**  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  的 2 维表示  $A_3$  在  $H = \{e, d, f\} < D_3$  中的分导表示  $A_3|_H$ 。

由前一例知该 2 维表示  $A_3$  实际为诱导表示  ${}_{H}U^{B_2}$ , 即

$$A_3|_H(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, A_3|_H(d) = \begin{pmatrix} \omega & 0 \\ 0 & \omega^2 \end{pmatrix}, A_3|_H(f) = \begin{pmatrix} \omega^2 & 0 \\ 0 & \omega \end{pmatrix},$$

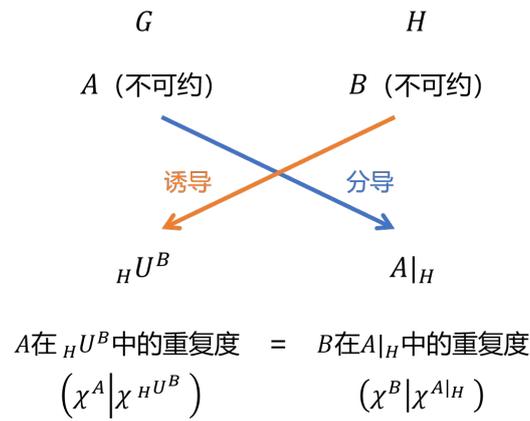


图 2.3: 弗罗宾尼斯互易定理示意图。

其中  $\omega = \exp(i2\pi/3)$ 。因此分导表示在子群  $H$  中的特征标为

$\chi$	$\{e\}$	$\{d\}$	$\{f\}$
$A_3 _H$	2	-1	-1

而  $H = C_3$  没有 2 维及以上的不等价不可约表示，因此分导表示  $A_3|_H$  为可约表示，可以分解为  $A_3|_H = {}_H U^{B_2}|_H = B_2 \oplus B_3$ 。可见群  $G$  的不可约表示往子群  $H$  分导，其分导表示不一定是子群  $H$  的不可约表示。

诱导表示和分导表示是建立在群和子群的结构关系上的，因此二者存在一定的关联，最直接的结果为以下定理。

■ **定理 2.14. 弗罗宾尼斯 (Frobenius) 互易定理** 设  $A, B$  分别是群  $G$  及其子群  $H$  的不可约表示，则  $A$  在  $B$  诱导的表示  ${}_H U^B$  中的重复度等于  $B$  在  $A|_H$  中的重复度，即  $(\chi^A | \chi^{{}_H U^B}) = (\chi^B | \chi^{A|_H})$ 。

证明. 弗罗宾尼斯互易定理需要证明的结果如图2.3所示。先看在群  $G$  中不可约表示  $A$  在诱导表示  ${}_H U^B$  中的重复度，记  $|G| = n, |H| = m$ ，则

$$\begin{aligned}
 (\chi^A | \chi^{{}_H U^B}) &= \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \chi^{A^*}(g) \chi^{{}_H U^B}(g) \\
 &= \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \chi^{A^*}(g) \frac{1}{m} \sum_{t \in G} \text{tr} \sigma(tgt^{-1}),
 \end{aligned} \tag{2.152}$$

令  $s = tgt^{-1}$ ，则

$$\begin{aligned}
 (\chi^A | \chi^{{}_H U^B}) &= \frac{1}{mn} \sum_{s, t \in G} \chi^{A^*}(t^{-1}st) \text{tr} \sigma(s) \\
 &= \frac{1}{mn} \sum_{t \in G} \sum_{s \in H} \chi^{A^*}(t^{-1}st) \text{tr} B(s) \\
 &= \frac{1}{m} \sum_{s \in H} \left[ \frac{1}{n} \sum_{t \in G} \chi^{A^*}(t^{-1}st) \right] \chi^B(s).
 \end{aligned} \tag{2.153}$$

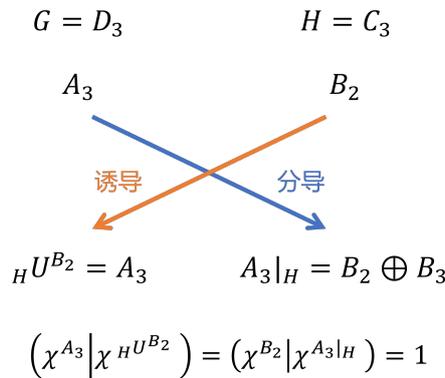
留意到当  $t$  取遍  $G$  中所有群元时,  $t^{-1}st$  给出  $s$  所有共轭元素, 而共轭元素的特征标相同, 即  $\frac{1}{n} \sum_{t \in G} \chi^{A^*}(t^{-1}st) =$

$\chi^{A^*}(s)$ , 于是

$$\begin{aligned}
 (\chi^A | \chi^U) &= \frac{1}{m} \sum_{s \in H} \chi^{A^*}(s) \chi^B(s) \\
 &= (\chi^{A|H} | \chi^B) \\
 &= (\chi^B | \chi^{A|H}).
 \end{aligned}
 \tag{2.154}$$

□

可以通过之前  $D_3$  与  $C_3$  间诱导表示与分导表示的例子理解弗罗宾尼斯互易定理。取  $G = D_3, H = C_3$ , 在  $H$  中以  $B_2$  做诱导表示  ${}_H U^{B_2}$ , 已证明该诱导表示实际为  $G$  的  $A_3$  表示; 在  $G$  中以  $A_3$  表示出发做  $H$  中的分导表示  $A_3|_H$ , 已证明该分导表示可被约化为  $A_3|_H = B_2 \oplus B_3$ 。因此  ${}_H U^{B_2}$  中包含一个  $A_3$ , 而  $A_3|_H$  中也包含一个  $B_2$ 。



**例 2.26.** 保持正四面体不变的转动操作的集合构成群, 称为正四面体群  $T$ , 求  $T$  群的特征标表。

正四面体可镶嵌于正方体中, 如图2.4(a)所示。我们先从正四面体的对称元素分析, 正四面体只有三次转轴和二次转轴:

1. 4 个三次转轴:  $A_1 B_1, A_2 B_2, A_3 B_3, A_4 B_4$ , 每个转轴给出 2 个非恒等操作;
2. 3 个二次转轴:  $x, y, z$  轴, 每个转轴给出 1 个非恒等操作。

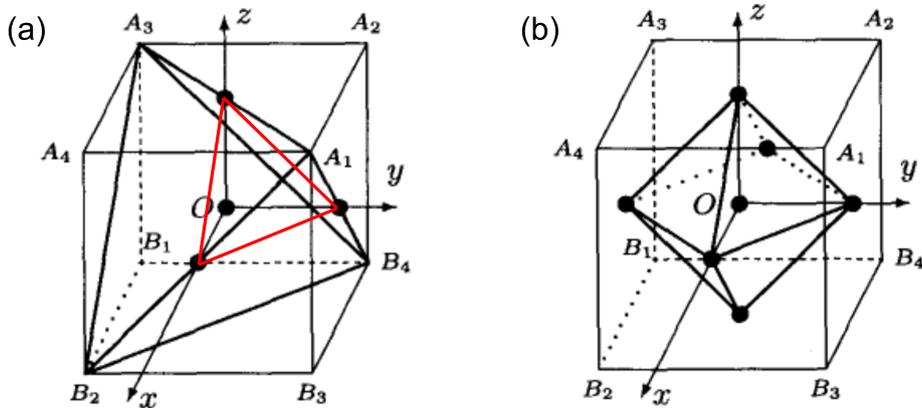


图 2.4: (a) 正四面体示意图。(b) 正八面体示意图。

因此,  $T$  群一共有  $2 \times 4 + 1 \times 3 + 1 = 12$  个群元。我们将三次转动记为  $\{C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}\}$ , 将二次转动记为  $\{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\}$ 。接下来对  $T$  群进行分类。由于二次转动联系起不同的三次轴, 因此所有

三次轴等价, 而且三次轴都是单向轴 (如对四面体而言,  $A_1$  和  $B_1$  不是等价点), 所以绕三次轴正负方向转动不等价; 由于三次转动联系起所有二次轴, 因此所有二次轴等价. 因此,  $T$  群有 4 个类, 分别为

$$\begin{aligned} K_1 &= \{e\} (1), \\ K_2 &= \{C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\} (3), \\ K_3 &= \{C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}\} (4), \\ K_4 &= \{C_3^{(1)2}, C_3^{(2)2}, C_3^{(3)2}, C_3^{(4)2}\} (4), \end{aligned}$$

其中括号内数字代表类中元素的个数.

由拉格朗日定理知  $T$  群只有一个真不变子群  $\{e, C_2^{(1)}, C_2^{(2)}, C_2^{(3)}\} \cong V_4$ ,  $T$  对  $V_4$  的商群为 3 阶群, 因此为循环群, 即  $T/V_4 \cong C_3$ ,  $T \sim C_3$ , 同态核为  $V_4$ .

$$\begin{aligned} T &\sim C_3 \\ V_4 &\longrightarrow e \\ C_3^{(1)}V_4 &\longrightarrow d \\ C_3^{(1)2}V_4 &\longrightarrow f \end{aligned}$$

我们可根据以上信息写出  $T$  群的特征标表. 由 Burnside 定理  $1^2 + 1^2 + 1^2 + 3^2 = 12$ ,  $T$  群有三个 1 维表示和一个 3 维表示, 且 1 维表示  $A_1$  为恒等表示. 其余两个 1 维表示, 可利用同态关系  $T \sim C_3$  得出,  $A_2$  把同态核  $V_4$  映为 1, 把陪集  $C_3^{(1)}V_4$  映为  $\omega$ ,  $C_3^{(1)2}V_4$  映为  $\omega^2$ ,  $\omega = \exp(i2\pi/3)$ ;  $A_3$  把同态核  $V_4$  映为 1, 把陪集  $C_3^{(1)}V_4$  映为  $\omega^2$ ,  $C_3^{(1)2}V_4$  映为  $\omega$ .

余下的 3 维表示  $A_4$ , 可以使用特征标第二定理求出. 根据特征标第二定理, 应有

$$\frac{1}{n} \sum_{p=1}^4 n_i \chi^{p*}(K_i) \chi^p(K_j) = \delta_{ij}.$$

利用  $K_2, K_3, K_4$  与  $K_1$  特征标的正交关系, 有

$$\begin{aligned} 1 + 1 + 1 + 3\chi^4(C_2^{(1)}) &= 0, \\ 1 + \omega + \omega^2 + 3\chi^4(C_3^{(1)}) &= 0, \\ 1 + \omega^2 + \omega + 3\chi^4(C_3^{(1)2}) &= 0, \end{aligned}$$

解得  $\chi^4(C_2^{(1)}) = -1$ ,  $\chi^4(C_3^{(1)}) = \chi^4(C_3^{(1)2}) = 0$ . 因此, 求出  $T$  群的特征标表如表 2.4 所示. 实际上, 3 维表示  $A_4$  也可以  $\mathbb{R}^3$  为表示空间求出. 如图 2.4(a) 建立坐标系, 可以写出每个类代表元素的矩阵表示, 分别为

$$\begin{aligned} A_4(e) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_4(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \\ A_4(C_3^{(1)}) &= \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A_4(C_3^{(1)2}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \end{aligned}$$

而求得特征标与利用正交关系求出的一致.

**例 2.27.** 保持正八面体不变的转动操作的集合构成群, 称为正八面体群  $O$ , 求  $O$  群的特征标表.

$T$	$\{e\}$	$3 \{C_2^{(1)}\}$	$4 \{C_3^{(1)}\}$	$4 \{C_3^{(1)2}\}$
$A_1$	1	1	1	1
$A_2$	1	1	$\omega$	$\omega^2$
$A_3$	1	1	$\omega^2$	$\omega$
$A_4$	3	-1	0	0

表 2.4:  $T$  群的特征标表。

正八面体可内接于正方体中, 如图2.4(b)所示。先从正八面体的对称元素分析, 正八面体具有四次、三次、二次转轴:

1. 3 个四次转轴:  $x, y, z$  轴, 每个转轴给出 3 个非恒等操作;
2. 4 个三次转轴:  $A_1B_1, A_2B_2, A_3B_3, A_4B_4$ , 每个转轴给出 2 个非恒等操作;
3. 6 个二次转轴: 正方体对棱中点连线 (如  $A_1B_3$  中点和  $A_3B_1$  中点连线), 每个转轴给出 1 个非恒等操作。

因此,  $O$  群一共有  $3 \times 3 + 2 \times 4 + 1 \times 6 + 1 = 24$  个群元。将四次转动记为  $\{C_4^{(1)}, C_4^{(2)}, C_4^{(3)}\}$ , 三次转动记为  $\{C_3^{(1)}, \dots, C_3^{(4)}\}$ , 二次转动记为  $\{C_2^{(1)}, \dots, C_2^{(6)}\}$ 。对  $O$  群进行类分割, 可以发现, 正八面体所有同转角的转轴都是等价的, 并且都是双向轴, 因此  $O$  群有五个类, 分别为

$$\begin{aligned} K_1 &= \{e\} (1), \\ K_2 &= \{C_3^{(1)}, \dots, C_3^{(4)}, C_3^{(1)2}, \dots, C_3^{(4)2}\} (8), \\ K_3 &= \{C_2^{(1)}, \dots, C_2^{(6)}\} (6), \\ K_4 &= \{C_4^{(1)}, C_4^{(1)3}, \dots, C_4^{(3)}, C_4^{(3)3}\} (6); \\ K_5 &= \{C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}, C_4^{(3)2}\} (3). \end{aligned}$$

可知  $O$  群有两个真不变子群, 分别为  $T = \{e, C_3^{(1)}, \dots, C_3^{(4)}, C_3^{(1)2}, \dots, C_3^{(4)2}, C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}, C_4^{(3)2}\}$ , 以及  $V_4 = \{e, C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}, C_4^{(3)2}\}$ 。  $O$  对  $T$  的商群为 2 阶群, 因此是循环群  $O/T \cong C_2$ ;  $O$  对  $V_4$  的商群为 6 阶群, 并且可以验证以  $V_4$  作陪集分割, 陪集  $g_i V_4$  与  $g_j V_4$  间的乘法并不对所有  $i, j$  互易, 因此  $O/V_4$  不同构于循环群, 因此  $O/V_4 \cong D_3$ 。

根据以上信息写出  $T$  群的特征标表, 由 Burnside 定理  $1^2 + 1^2 + 2^2 + 3^2 + 3^2 = 24$ ,  $O$  群有两个 1 维表示, 一个 2 维表示, 及两个 3 维表示。1 维表示  $A_1$  为恒等表示, 1 维非恒等表示  $A_2$  由同态关系  $O \sim C_2$  给出, 同态核为  $T$ , 即同态映射将  $T = \{K_1, K_2, K_5\}$  映为 1, 将陪集  $\{K_3, K_4\}$  映为 -1。

2 维表示  $A_3$  可由同态关系  $O \sim D_3$  给出, 利用到  $D_3$  的 2 维不等价不可约表示

$$\chi(e|_{D_3}) = 2, \chi(d|_{D_3}) = -1, \chi(a|_{D_3}) = 0,$$

同态核  $V_4 \rightarrow e|_{D_3}$ , 三次转动操作  $C_3^{(1)} \rightarrow d|_{D_3}$ ,  $C_3^{(1)2} \rightarrow f|_{D_3}$ , 因此该 2 维表示的特征标为

$$\chi^3(e) = \chi^3(C_4^{(1)2}) = 2, \chi^3(C_3^{(1)}) = -1, \chi^3(C_2^{(1)}) = \chi^3(C_4^{(1)}) = 0,$$

且内积  $(\chi^3|\chi^3) = 1$ , 因此是不可约表示。

我们还可以利用前面提到的诱导表示的概念, 利用  $O$  群的不变子群  $T$  群的一维非恒等表示  $A_2$  来得到  $O$  群的一个二维表示。接下来要做的事情就是做陪集分割,  $O = \{Tg_0, Tg_1\}$ , 这里  $g_0$  是单位元素,  $g_1$  有多种选择, 我们取  $g_1 = C_2^{(1)}$ 。利用诱导表示的表示矩阵:

$${}_H U^B(g) = \begin{pmatrix} \sigma(g_0 g g_0^{-1}) & \sigma(g_0 g g_1^{-1}) \\ \sigma(g_1 g g_0^{-1}) & \sigma(g_1 g g_1^{-1}) \end{pmatrix}.$$

其中:

$$\sigma(g_i g g_j^{-1}) = \begin{cases} A_2(g_i g g_j^{-1}), & \text{if } g_i g g_j^{-1} \in T, \\ 0, & \text{if } g_i g g_j^{-1} \notin T. \end{cases}$$

而:

$$\sigma(g_i g g_j^{-1}) = \begin{cases} 1, & \text{if } g_i g g_j^{-1} \in \{e, C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}, C_4^{(3)2}\}, \\ \epsilon, & \text{if } g_i g g_j^{-1} \in \{C_3^{(1)}, C_3^{(2)}, C_3^{(3)}, C_3^{(4)}\}, \\ \epsilon^2, & \text{if } g_i g g_j^{-1} \in \{C_3^{(1)2}, C_3^{(2)2}, C_3^{(3)2}, C_3^{(4)2}\}. \end{cases}$$

再利用 (2.151) 式:

$$\chi^U(g) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} \sigma(tgt^{-1}),$$

我们很容易得到:

$$\chi^U(e) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} \sigma(tet^{-1}) = \frac{1}{12} \cdot 24 \cdot 1 = 2,$$

$$\chi^U(C_3^{(1)}) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} \sigma(tC_3^{(1)}t^{-1}) = \frac{1}{12} \cdot 12 \cdot (\epsilon + \epsilon^2) = -1,$$

$$\chi^U(C_4^{(1)}) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} (\sigma(tC_4^{(1)}t^{-1})) = 0 \quad (tC_4^{(1)}t^{-1} \notin T),$$

$$\chi^U(C_4^{(1)2}) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} (\sigma(tC_4^{(1)2}t^{-1})) = \frac{1}{12} \cdot 24 \cdot 1 = 2 \quad (tC_4^{(1)2}t^{-1} \in \{C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}, C_4^{(3)2}\}),$$

$$\chi^U(C_2^{(1)}) = \frac{1}{|H|} \sum_{t \in O} \text{tr} (\sigma(tC_2^{(1)}t^{-1})) = 0 \quad (tC_2^{(1)}t^{-1} \notin T).$$

对于三维表示, 以  $\mathbb{R}^3$  为表示空间

$$A_4(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A_4(C_3^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_4(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A_4(C_4^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

$$A_4(C_4^{(1)2}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}.$$

$O$	$1\{e\}$	$8\{C_3^{(1)}\}$	$6\{C_2^{(1)}\}$	$6\{C_4^{(1)}\}$	$3\{C_4^{(1)2}\}$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	-1	1
$A_3$	2	-1	0	0	2
$A_4$	3	0	-1	1	-1
$A_5$	3	0	1	-1	-1

表 2.5:  $O$  群的特征标表。

因此特征标为

$$\chi^4(e) = 3, \chi^4(C_3^{(1)}) = 0, \chi^4(C_2^{(1)}) = \chi^4(C_4^{(1)2}) = -1, \chi^4(C_4^{(1)}) = 1,$$

可以验证为不可约表示。

对于另一个 3 维表示  $A_5$ , 可由特征标第二定理推定。利用不同类特征标的正交关系

$$\begin{aligned} 1 + 1 - 2 + 0 + 3\chi^5(C_3^{(1)}) &= 0, \\ 1 - 1 + 0 - 3 + 3\chi^5(C_2^{(1)}) &= 0, \\ 1 - 1 + 0 + 3 + 3\chi^5(C_4^{(1)}) &= 0, \\ 1 + 1 + 4 - 3 + 3\chi^5(C_4^{(1)2}) &= 0, \end{aligned}$$

求得

$$\chi^5(C_3^{(1)}) = 0, \chi^5(C_2^{(1)}) = 1, \chi^5(C_3^{(1)}) = 0, \chi^5(C_2^{(1)}) = 1, \chi^5(C_4^{(1)}) = \chi^5(C_4^{(1)2}) = -1$$

可以验证为不可约表示。

实际上, 可以验证由  $T$  群的 3 维表示  $B_4$  在  $O$  群中诱导的 6 维表示  ${}_T U^{B_4}$  可以分解为  $A_4 \oplus A_5$ 。因为  $A_4$  和  $A_5$  在  $T$  群中的分导表示都是  $B_4$ , 由弗罗宾尼斯互易定理知

$$\begin{aligned} (\chi^{A_4} | \chi^{T U^{B_4}}) &= (\chi^{B_4} | \chi^{A_4} |_T) = (\chi^{B_4} | \chi^{B_4}) = 1, \\ (\chi^{A_5} | \chi^{T U^{B_4}}) &= (\chi^{B_4} | \chi^{A_5} |_T) = (\chi^{B_4} | \chi^{B_4}) = 1, \end{aligned}$$

而  $A_4 \oplus A_5$  是 6 维表示, 因此  ${}_T U^{B_4} = A_4 \oplus A_5$ 。

由于正八面体于外接正方体存在一一对应关系,  $O$  群也是保持正方体不变的旋转对称群; 而正方体由四根体对角线完全确定, 对体对角线的置换操作构成置换群  $S_4$ , 因此  $O \cong S_4$ 。

**例 2.28.** 将正方体沿着体对角线方向拉伸, 求此时的旋转变换群, 以及  $O$  群不等价不可约表示在此群下的分导表示。

将正方体沿体对角线方向拉伸后, 如图 2.5 所示, 四次转轴消失, 因此最高次轴变为三次转轴, 此外仅剩三个对棱中点连线的二次转轴, 因此此时的旋转变换群从  $O$  群变为  $D_3$  群, 从图 2.5 (b) 可以更直观判断。显然此  $D_3$  群是  $O$  群的子群, 写出其对应的群元为  $\{e, C_3^{(1)}, C_3^{(1)2}, C_2^{(4)}, C_2^{(5)}, C_2^{(6)}\}$ , 类分割为  $\{e\}, \{C_3^{(1)}, C_3^{(1)2}\}, \{C_2^{(4)}, C_2^{(5)}, C_2^{(6)}\}$ , 写出  $O$  群不等价不可约表示  $A_1, \dots, A_5$  在  $D_3$  中的分导表示的特征标为,

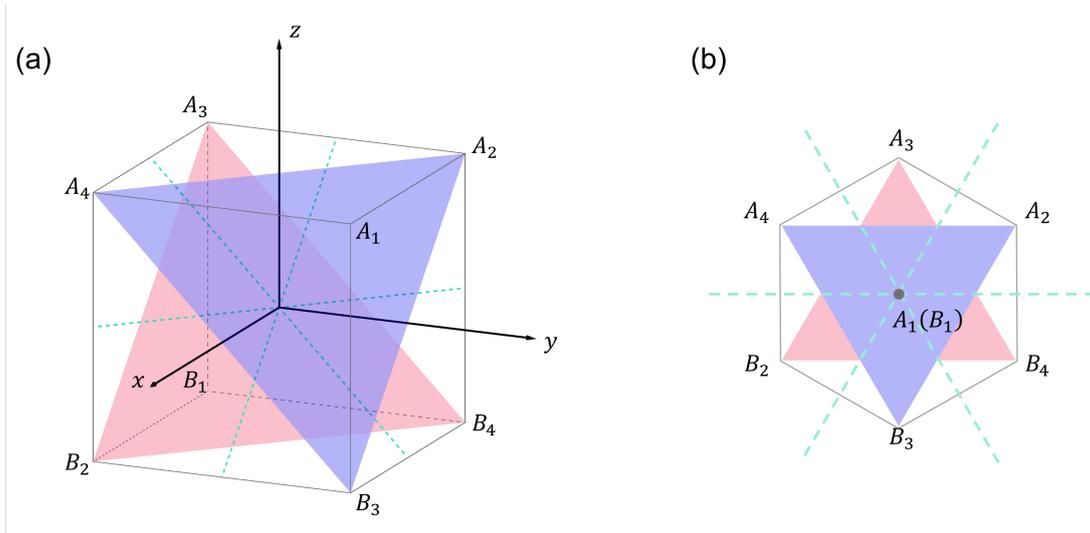


图 2.5: (a) 正方体沿体对角线方向拉伸示意图, 绿色虚线表示二次转轴。(b) 沿着对角线 (111) 方向视图。

$O$	$1\{e\}$	$8\{C_3^{(1)}\}$	$6\{C_2^{(1)}\}$	$6\{C_4^{(1)}\}$	$3\{C_4^{(1)2}\}$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	-1	1
$A_3$	2	-1	0	0	2
$A_4$	3	0	-1	1	-1
$A_5$	3	0	1	-1	-1

表 2.6:  $O$  群的特征标表。

最后一列表示分导表示特征标自身的内积。对比  $D_3$  群的特征标表 2.3 后, 可知前三个分导表示都是  $D_3$  群的不等价不可约表示  $B_1, B_2, B_3$ , 而两个 3 维表示的分导表示都是可约的

$$A_4|_{D_3} = B_2 \oplus B_3, A_5|_{D_3} = B_1 \oplus B_3.$$

**例 2.29.** 将正方体沿着高方向拉伸, 求此时的旋转变换群, 以及  $O$  群不等价不可约表示在此群下的分导表示。

将正方体沿高方向 ( $z$  方向) 拉伸后, 如图 2.6 所示, 此时三次转轴消失, 只剩下四次轴和二次轴, 且  $xy$  方向的四次转动操作也不再保持体系不变, 因此, 此时的旋转变换群为  $D_4$ 。类分割为  $\{e\}, \{C_4^{(3)}, C_4^{(3)3}\}, \{C_4^{(3)2}\}, \{C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}\}, \{C_2^{(1)}, C_2^{(4)}\}$ , 后面两类即为二面体群中不等价的  $\{S_0\}$  和  $\{S_1\}$ 。

我们先写出  $D_4$  群的特征标表, 由 Burnside 定理  $1^2 + 1^2 + 1^2 + 1^2 + 2^2 = 8$ , 即  $D_4$  有四个 1 维的和有一个 2 维的不等价不可约表示。 $B_1$  为恒等表示, 利用同态关系  $D_4 \sim C_2$  给出 1 维表示  $B_2$ , 同态核为  $C_4 = \{e, C_4^{(3)}, C_4^{(3)3}, C_4^{(3)2}\}$ 。同时,  $D_4$  仍有两个真不变子群  $V_4 = \{e, C_4^{(3)2}, C_4^{(1)2}, C_4^{(2)2}\}$  及  $V'_4 = \{e, C_4^{(3)2}, C_2^{(1)}, C_2^{(4)}\}$ , 因此给出同态关系  $D_4 \sim C_2$ , 这两个同态关系给出另外两个 1 维表示  $B_3$  和  $B_4$ 。剩余的 2 维表示可由正交关系得出, 也能以  $\mathbb{R}^2$  为表示空间给出。最后  $D_4$  的特征标表如表 2.7 所示。

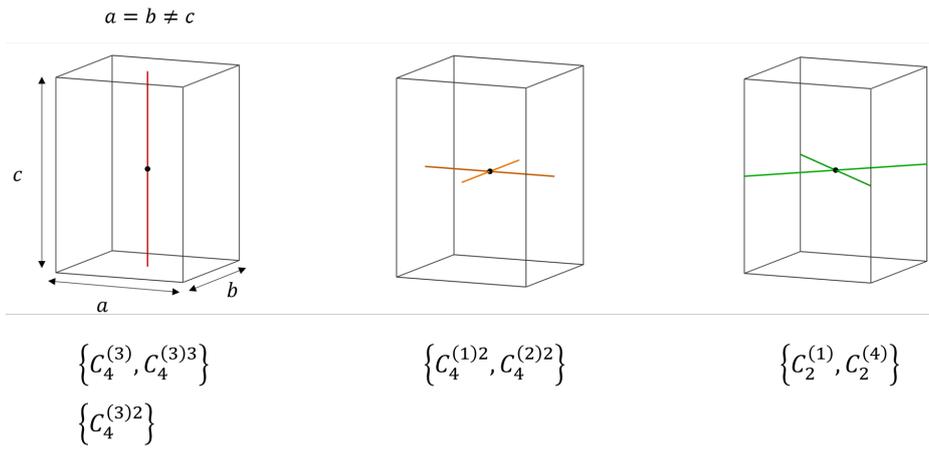


图 2.6: 正方体沿高方向拉伸示意图。

$D_4$	$1 \{e\}$	$1 \{C_4^{(3)2}\}$	$2 \{C_4^{(3)}\}$	$2 \{C_4^{(1)2}\}$	$2 \{C_2^{(1)}\}$
$B_1$	1	1	1	1	1
$B_2$	1	1	1	-1	-1
$B_3$	1	1	-1	1	-1
$B_4$	1	1	-1	-1	1
$B_5$	2	-2	0	0	0

表 2.7:  $D_4$  群的特征标表。

写出  $O$  群不等价不可约表示  $A_1, \dots, A_5$  在  $D_4$  中的分导表示的特征标为

	$1 \{e\}$	$1 \{C_4^{(3)2}\}$	$2 \{C_4^{(3)}\}$	$2 \{C_4^{(1)2}\}$	$2 \{C_2^{(1)}\}$	$(\chi \chi)$
$A_1 _{D_4}$	1	1	1	1	1	1
$A_2 _{D_4}$	1	1	-1	1	-1	1
$A_3 _{D_4}$	2	2	0	2	0	2
$A_4 _{D_4}$	3	-1	1	-1	-1	2
$A_5 _{D_4}$	3	-1	-1	-1	1	2

首先我们由内积为 1 判断前两个分导表示  $A_1|_{D_4}$  和  $A_2|_{D_4}$  是不可约的, 且  $A_1|_{D_4} = B_1, A_2|_{D_4} = B_3$ 。通过特征标给出重复度, 知道其余可约表示为

$$A_3|_{D_4} = B_1 \oplus B_3, A_4|_{D_4} = B_2 \oplus B_5, A_5|_{D_4} = B_4 \oplus B_5.$$

### 3 完全转动群

#### 3.1 连续群简介

在第 2 章中, 我们学习了群表示, 特别是有限群的表示理论。实际上, 除了有限群外, 我们通常会接触很多无限群, 比如之前的实数加群  $\{\mathbb{R}, +\}$ 。在物理学研究中, 最常见的无限群有三维实正交群  $O(3)$ , 三维转动群  $SO(3)$ , 定轴转动群  $SO(2)$ , 及二维幺模酉矩阵群  $SU(2)$  等, 我们将在下文给出以上群的定义。通常而言, 无限群又能分成两类, 一类的群元是分立无限的, 如整数加群  $\{\mathbb{Z}, +\}$ ; 另一类的群元是连续无限的, 如定轴旋转群  $SO(2)$ , 其群元由连续的参数转角  $\theta$  刻画。对于群元为分立无限的群, 大部分有限群的结论是同样适用的, 因为这两种群元间有类似的关系。但是对于群元是连续无限的群, 则需要额外研究, 比如李群等。

李群既具有代数上群的性质, 又具有几何上拓扑的性质, 进一步还是一个连续流形 (流形即每一点的开邻域都和  $\mathbb{R}^n$  的某开集同胚的拓扑空间。粗略的说, 就是局域看起来像  $\mathbb{R}^n$  的集合, 可看成是若干“欧式空间”拼接而成), 具有很多分析的性质。因此李群的研究涉及的数学领域很广泛。数学家在 1952 年曾证明: 所有的连续群本质上都是李群。完整的李群内容一般放在微分几何课程中学习, 这里主要从群表示论的角度介绍一些李群的一些基本概念和性质。

我们以常见的四个无限群为例, 简单介绍无限群的知识。为了讨论三维实正交群  $O(3)$ , 我们先给出正交变换的定义。

§ 定义 3.1. 正交变换 三维实空间  $\mathbb{R}^3$  中的保内积变换。

注 1.  $\mathbb{R}^3$  为实内积空间, 内积空间的概念可见定义 2.15。

注 2. 对于复内积空间, 保内积变换即酉变换, 满足  $(U\mathbf{x}|U\mathbf{y}) = (\mathbf{x}|\mathbf{y})$ , 或者  $U^\dagger U = UU^\dagger = E$ , 而正交变换则是实的酉变换, 因此满足  $O^T O = O O^T = E$ ,  $T$  表示转置操作。

注 3. 正交变换也是描述三维单位球的对称变换。

由于正交变换  $O$  满足  $O^T O = O O^T = E$ , 取行列式有

$$\det(O^T O) = (\det O)^2 = 1 \Rightarrow \det O = \pm 1. \quad (3.1)$$

在欧式空间中选取一组标准正交基后, 正交变换与正交矩阵一一对应, 且保持乘法规则不变。因此, 我们取所有正交变换作为集合, 定义乘法为正交变换的相继作用, 构成群结构。

§ 定义 3.2.  $O(3)$  群 由三维欧式空间中所有的正交变换构成的群, 称为三维实正交群 (orthogonal group), 记为  $O(3)$ 。

可以验证单位元为恒等变换  $E$ , 逆元素为  $O^{-1} = O^T$ , 结合律成立, 且两个正交变换的乘积也是正交变换, 满足封闭性, 即  $\forall O_i, O_j \in O(3)$ , 有

$$(O_i O_j)^T (O_i O_j) = O_j^T O_i^T O_i O_j = E, O_i O_j \in O(3). \quad (3.2)$$

当然, 也能从行列式验证  $\det(O_i O_j) = \det O_i \det O_j = \pm 1$ 。显然,  $O(3)$  为无限群, 并且我们能得到它的一个子群。

§ 定义 3.3.  $SO(3)$  群  $O(3)$  群的所有行列式为 1 的正交变换形成的不变子群称为三维转动群, 记为  $SO(3)$  (*special orthogonal group*)。

很容易验证  $\{O \mid \det O = 1\}$  形成子群, 因为它包含恒等变换  $e$ , 且是封闭的  $\forall O_1, O_2 \in SO(3), \det(O_1 O_2) = 1, O_1 O_2 \in SO(3)$ 。同时, 可以证明  $SO(3)$  是由  $O(3)$  完整的类构成的子群, 因为对  $\forall O_i \in SO(3)$ , 当  $O_j$  取遍  $O(3)$  中所有元素时,  $O_j^{-1} O_i O_j$  将给出与  $O_i$  等价的所有元素, 而

$$\det(O_j^{-1} O_i O_j) = \det O_j^{-1} \det O_i \det O_j = \det O_i = 1, \quad (3.3)$$

可见,  $SO(3)$  包含  $O_i$  的所有等价元素, 即  $SO(3)$  是由  $O(3)$  完整类构成的子群, 因此是  $O(3)$  的不变子群  $SO(3) \triangleleft O(3)$ 。

对  $O(3)$  做  $SO(3)$  的子群陪集分割, 由于  $SO(3)$  包含所有行列式为 1 的正交变换, 则其陪集包含所有行列式为 -1 的正交变换。通常取陪集代表元为空间反演操作, 即

$$I : (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z), \quad (3.4)$$

陪集表示为  $ISO(3)$ 。并且空间反演  $I$  是自成一类的, 因为  $\forall O \in O(3), O^{-1} I O = I$ , 因此  $\mathbb{Z}_2 = \{E, I\}$  也是  $O(3)$  的不变子群, 并且有关系

$$O(3)/SO(3) \cong \mathbb{Z}_2, \quad O(3) \sim \mathbb{Z}_2. \quad (3.5)$$

同时, 因为  $SO(3)$  与  $\mathbb{Z}_2 = \{E, I\}$  仅有单位元为共同元素, 且所有元素是对易的,  $O(3)$  还存在直积分解

$$O(3) = SO(3) \otimes \mathbb{Z}_2. \quad (3.6)$$

$O(3)$  群的直积结构表明, 我们只需要研究  $SO(3)$  的群结构及其群表示, 便可给出  $O(3)$  的完整信息。

注意到我们一般将  $SO(3)$  称为三维转动群, 是因为行列式为 1 的正交变换是保持手性的, 这正是三维欧式空间的转动操作。手性的定义为混合积  $\mathbf{i} \cdot (\mathbf{j} \times \mathbf{k})$  的符号, 约定  $\mathbf{i} \cdot (\mathbf{j} \times \mathbf{k}) = 1$ , 即为右手坐标系。对  $\forall O \in SO(3)$ , 若以  $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$  为基写出  $O$  的矩阵为 (为书写方便, 我们在此不区分变换  $O$  和其矩阵表示  $[O]$ )

$$O = \begin{pmatrix} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{pmatrix}, \quad (3.7)$$

则该变换对混合积的作用为

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \cdot (\mathbf{j} \times \mathbf{k}) &\xrightarrow{O} O\mathbf{i} \cdot (O\mathbf{j} \times O\mathbf{k}) \\ &= \begin{pmatrix} a_{11} \\ a_{21} \\ a_{31} \end{pmatrix} \cdot \left[ \begin{pmatrix} a_{12} \\ a_{22} \\ a_{32} \end{pmatrix} \times \begin{pmatrix} a_{13} \\ a_{23} \\ a_{33} \end{pmatrix} \right] \\ &= \det O \\ &= 1, \end{aligned} \quad (3.8)$$

因此  $SO(3)$  中所有的变换都是保持手性的, 故此这些变换是转动操作。相反, 在陪集中, 我们取陪集代表元  $I$ , 矩阵表示为

$$I = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad (3.9)$$

作用在混合积上为

$$\begin{aligned} \mathbf{i} \cdot (\mathbf{j} \times \mathbf{k}) &\xrightarrow{I} I\mathbf{i} \cdot (I\mathbf{j} \times I\mathbf{k}) \\ &= -\mathbf{i} \cdot (\mathbf{j} \times \mathbf{k}) \\ &= -1, \end{aligned} \quad (3.10)$$

因此  $ISO(3)$  中所有变换都是改变手性的, 因此也被称为转动反演操作。

$SO(3)$  描述的是三维单位球的转动操作, 其中绕特定轴旋转的操作构成  $SO(3)$  的一个子群。由于球对称性是物理学中最常见的对称性,  $SO(3)$  在物理中有广泛的应用。另一方面, 在数学上  $SO(3)$  群是最简单的多连通 Abel 李群。

§ 定义 3.4.  $SO(2)$  群 三维欧式空间中绕定轴转动任意角的变换的集合称为定轴转动群, 记为  $SO(2)$ 。

$SO(2)$  也是描述二维单位圆的旋转变换群, 因此也记为  $C_\infty$ , 任意  $n$  阶循环群都是其子群  $C_n < C_\infty$ 。最后再介绍一个常见的无限群。

§ 定义 3.5.  $SU(2)$  群 由行列式为 1 的所有二阶酉矩阵组成的群, 记为  $SU(2)$ 。

所有  $n$  阶酉矩阵本身也构成一个群, 称为  $U(n)$  群,  $SU(2)$  是  $U(2)$  的子群。 $SU(2)$  在物理中有极其重要的应用, 如旋量, 同位旋理论等。除此之外, 数学上:  $SU(2)$  是最简单也最重要的非阿贝尔李群, 所有非 Abel 李群都含有  $SU(2)$  作为其子群。 $SU(2)$  是构成其他非 Abel 李群的基础。

可以看到上述四个群的群元都是连续无限个的, 如定轴转动变换可用一个连续参数, 即转角  $\theta \in [0, 2\pi)$  来刻画。我们将这类无限群称为连续群。

§ 定义 3.6. 连续群 连续群  $G$  的元素由一组实参数  $a_1, a_2, \dots, a_n$  所标明, 其中至少有一个参数在某一区域上连续变化, 且该组参数对标明群的所有元素是必需而且足够的。则该组参数中连续参数的个数  $r$  称为连续群的维数。

例 3.1. 定轴旋转群  $SO(2)$  是 1 维连续群, 因为其群元  $C_k(\theta)$  由一个连续参数  $\theta \in [0, 2\pi)$  标明。

例 3.2. 一维线性变换:  $x' = ax + b$ ,  $a, b \in (-\infty, +\infty)$ ,  $a \neq 0$ , 构成二维连续群。

我们可将线性变换记为  $x' = ax + b = T(a, b)x$ , 可验证:

1. 单位元:  $T(1, 0)$ ,  $T(1, 0)x = x$ ;
2. 封闭性:  $\forall a_i, b_j \in (-\infty, +\infty), a_i \neq 0$

$$\begin{aligned} T(a_1, b_1)T(a_2, b_2)x &= T(a_1, b_1)(a_2x + b_2) \\ &= a_1a_2x + a_1b_2 + b_1 \\ &= T(a_1a_2, a_1b_2 + b_1), \end{aligned}$$

即  $T(a_1, b_1)T(a_2, b_2) = T(a_1a_2, a_1b_2 + b_1)$  也是线性变换;

3. 逆元素:  $T^{-1}(a, b) = T\left(\frac{1}{a}, -\frac{b}{a}\right)$ ;

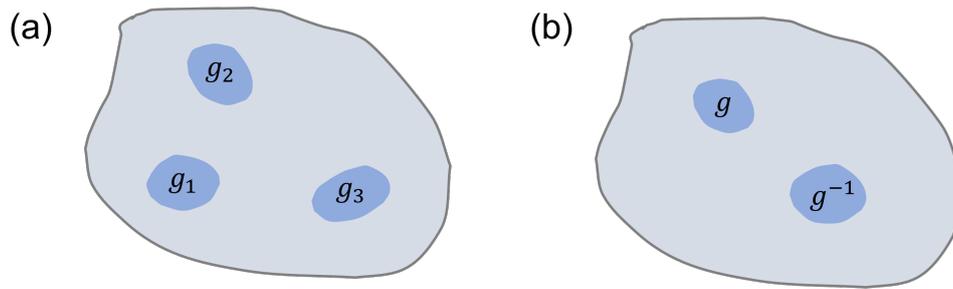


图 3.1: (a) 乘法的连续性。(b) 取逆的连续性。

## 4. 结合律:

$$\begin{aligned} [T(a_1, b_1)T(a_2, b_2)]T(a_3, b_3) &= T(a_1, b_1)[T(a_2, b_2)T(a_3, b_3)] \\ &= T(a_1a_2a_3, a_1a_2b_3 + a_1b_2 + b_1), \end{aligned}$$

所以  $T(a, b)$  构成群, 且由两个连续参数描述, 即为二维连续群。

以上述一维线性变换群为例, 封闭性和逆元素其实是满足以下两个关系:

$$\begin{aligned} T(a_1, b_1)T(a_2, b_2) &= T(c_1(a_1, b_1; a_2, b_2), c_2(a_1, b_1; a_2, b_2)), \\ T^{-1}(a, b) &= T(d_1(a, b), d_2(a, b)), \end{aligned}$$

其中  $c_{1,2}$  给出两个群元相乘时参数需要满足的函数关系, 而  $d_{1,2}$  给出群元求逆时参数需要满足的函数关系。通常而言, 我们希望这些函数足够良好, 最简单的要求是这些函数都是连续的, 我们将满足这个条件的连续群称为拓扑群。

§ 定义 3.7. 拓扑群 群元的乘法法则和取逆法则在群的所有元素处都连续的群, 称为拓扑群。若拓扑群的参数空间是紧致空间, 即封闭有界的空间, 则该群称为**紧致群**。

如图3.1所示, 这里乘法和取逆在群元处是连续的, 意味着:

1. 乘法法则连续:  $\forall g_1, g_2 \in G$ ,  $g_1$  的邻域和  $g_2$  的邻域的乘积是  $g_3 = g_1g_2$  的邻域;
2. 取逆法则连续:  $\forall g, g_1 \in G$ ,  $g_1$  在  $g$  的邻域, 则  $g_1^{-1}$  在  $g^{-1}$  的邻域。

紧致性是描述参数空间的性质, 因为当函数关系确定后, 给定参数空间将给出整个群。如  $SO(2)$  是紧致的, 因为其参数空间  $\theta \in [0, 2\pi)$  是封闭有界的。当对参数空间进行更仔细的分类, 可以得到更仔细的拓扑群分类。

§ 定义 3.8. 简单群和混合群 拓扑群  $G$  的任意两个元素  $x_1$  和  $x_2$  在参数空间中如果能用一条或者多条道路连接, 亦即参数空间连成一片, 则该群的参数空间是连通的, 该群称为连通群或简单群。反之, 如果群的参数空间形成不相连结的若干片, 则该群称为混合群。

混合群参数空间如图3.2所示。

**例 3.3.**  $O(3)$  群是混合群, 因为其参数空间可以分为不连通的两片, 分别代表  $\det O = 1$  ( $SO(3)$ ) 和  $\det O = -1$  ( $ISO(3)$ ) 的部分。

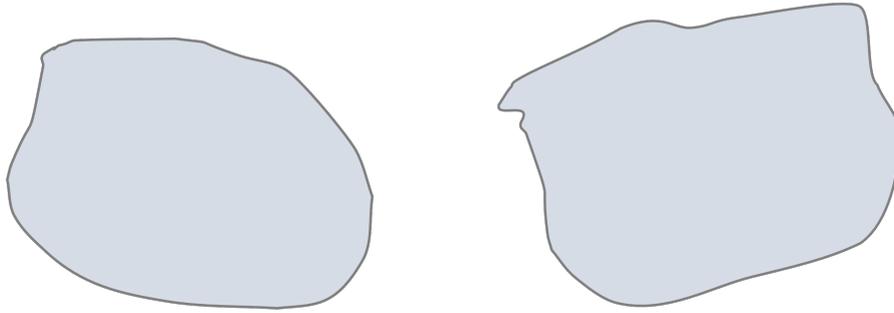


图 3.2: 不连通的参数空间拓扑结构示意图。

我们之前从一维线性变换的乘法函数  $c_{1,2}$  和取逆函数  $d_{1,2}$  的连续性出发, 得到拓扑群的定义。若乘法函数和取逆函数满足更强的要求, 则此时的拓扑群将有更强的结构关系。

**§ 定义 3.9. 李群**  $r$  维拓扑群  $G$  的任意两个元素,  $x_1(a_1, a_2, \dots, a_r)$ ,  $x_2(b_1, b_2, \dots, b_r)$  的乘法运算和取逆运算:  $x_1 x_2 = x_3(c_1, c_2, \dots, c_r)$ ,  $x_1^{-1} = x_4(d_1, d_2, \dots, d_r)$ , 参数之间的关系称为**组合函数**:  $c_i = c_i(a_1, a_2, \dots, a_r; b_1, b_2, \dots, b_r)$ ,  $d_i = d_i(a_1, a_2, \dots, a_r)$ ,  $i = 1, 2, \dots, r$ 。若以上组合函数均为解析函数, 则该群称为李群。

数学上, 解析函数为局部上由收敛幂级数给出的函数, 是无穷可微的函数。这意味着我们可以使用微积分工具来研究组合函数的局域性质, 继而理解李群的局域结构。而李群本质上是一个微分流形。

**例 3.4.** 一维线性变换群  $\{T(a, b) \mid \forall a, b \in \mathbb{R}, a \neq 0\}$  满足

$$T(a_1, b_1)T(a_2, b_2) = T(a_1 a_2, a_1 b_2 + b_1),$$

$$T^{-1}(a, b) = T\left(\frac{1}{a}, -\frac{b}{a}\right),$$

则组合函数为

$$c_1(a_1, b_1; a_2, b_2) = a_1 a_2,$$

$$c_2(a_1, b_1; a_2, b_2) = a_1 b_2 + b_1,$$

$$d_1(a, b) = \frac{1}{a},$$

$$d_2(a, b) = -\frac{b}{a},$$

都为解析函数, 因此一维线性变换群是李群。

我们通常只关心简单(连通)李群, 因为对于混合李群有以下定理。

**■ 定理 3.1.** 混合李群中, 包含单位元的那个连续片对应群元的集合构成该混合李群的不变子群(它是一个简单李群), 其他元素片对应元素的集合构成该不变子群的陪集。

证明. 记混合李群为  $G$ , 包含单位元的连续片为  $G_0$ , 可以证明  $G_0$  本身也是李群。由于结合律和单位元已满足, 只需证明  $G_0$  满足封闭性和包含其元素的逆元素即可。由于连通拓扑空间再连续映射后的像也是连通的, 对  $G_0$  中所有元素取逆, 是一个连续映射, 该映射将连通片  $G_0$  映射为  $G$  的一个连通片, 并且这连通片

需要包含单位元的逆  $e^{-1} = e$ , 因此映射后的像是  $G_0$  本身, 所以  $G_0$  包含其中所有元素的逆。对于封闭性可类似的证明。因此  $G_0$  也构成一个群, 并且是简单李群。

再证明  $G_0$  是  $G$  的不变子群。考虑  $\forall g \in G, h \in G_0$ , 作用  $ghg^{-1}$  将连通片  $G_0$  连续映射为  $G$  的一个连通片, 并且包含  $geg^{-1} = e$ , 因此  $ghg^{-1} \in G_0$ , 所以  $G_0 \triangleleft G$ 。显然其他连续片可表示为  $g_j G_0$ ,  $g_j$  为陪集代表元。□

我们看几个李群的例子。

**例 3.5.** 一般线性群: 所有  $n$  阶可逆实矩阵的集合在矩阵乘法下构成群, 为一般实线性群  $GL(n, \mathbb{R})$ , 是  $n^2$  维实数李群; 所有  $n$  阶可逆复矩阵的集合在矩阵乘法下构成群, 为一般复线性群  $GL(n, \mathbb{C})$ , 可以认为是  $2n^2$  维实数李群, 也能认为是  $n^2$  维复数李群。

**例 3.6.** 正交群: 所有  $n$  阶正交矩阵的集合在矩阵乘法下构成群, 为  $n$  阶正交群

$O(n) = \{Q | Q \in GL(n, \mathbb{R}), Q^T Q = Q Q^T = I_n\}$ 。由于  $O(n)$  为  $GL(n, \mathbb{R})$  中满足  $Q^T Q = I_n$  的子群, 对  $n$  阶对称矩阵给出  $n(n+1)/2$  个约束方程, 因此正交群的维数为

$$\dim O(n) = n^2 - \frac{n(n+1)}{2} = \frac{n(n-1)}{2}.$$

**例 3.7.** 洛伦兹群: 所有洛伦兹变换  $\Lambda^{-1} \eta \Lambda = \eta$  的集合 ( $\eta$  为四维闵可夫斯基度规张量), 可以认为是广义正交群  $O(1, 3)$ , 是一个六维李群

$$\dim O(1, 3) = 6,$$

包含三个方向的转动变换和三个方向的洛伦兹 *boost* 变换。

**例 3.8.** 酉群: 所有  $n$  阶酉矩阵的集合构成群, 为  $n$  阶酉群  $U(n) = \{U | U \in GL(n, \mathbb{C}), U^\dagger U = U U^\dagger = I_n\}$ 。作为实李群,  $U^\dagger U = I_n$  给出  $n^2$  个约束方程, 因此

$$\dim U(n) = n^2.$$

**例 3.9.** 特殊群: 在以上群的基础上, 进一步要求矩阵的行列式为 1, 给出以上群的特殊子群。

1. 特殊实线性群:  $SL(n, \mathbb{R}) = \{T | T \in GL(n, \mathbb{R}), \det T = 1\}$ , 维数为

$$\dim SL(n, \mathbb{R}) = n^2 - 1.$$

2. 特殊复线性群:  $SL(n, \mathbb{C}) = \{T | T \in GL(n, \mathbb{C}), \det T = 1\}$ , 维数为 (实参数)

$$\dim SL(n, \mathbb{C}) = 2n^2 - 2.$$

3. 特殊正交群:  $SO(n) = \{Q | Q \in O(n), \det Q = 1\}$ , 维数为

$$\dim SO(n) = \frac{n(n-1)}{2}.$$

注意  $\dim SO(n) = \dim O(n)$ , 因为  $O(n)$  不是连通群, 行列式为 1 的要求只是把参数空间从两片减少为一片, 而在同一片内没有减少参数空间的维数。

4. 特殊酉群:  $SU(n) = \{U | U \in U(n), \det U = 1\}$ , 维数为

$$\dim SU(n) = n^2 - 1.$$

注意因为酉群是连通群, 行列式为 1 的要求减少了参数空间的维数。

$O(n)$  与  $SO(n)$ 、 $U(n)$  与  $SU(n)$  群在维数上的区别可以从以下例子看出： $O(1) = \{1, -1\}$  为非连通（混合）的零维李群，而行列式为 1 的要求使得  $SO(1) = \{1\}$ ，同样是零维李群，并没有改变参数空间的维数；相反， $U(1) = \{e^{i\theta} | \theta \in [0, 2\pi)\}$  是连通李群，且由一个连续参数  $\theta$  刻画，所以是 1 维李群，行列式为 1 的要求使得  $SU(1) = \{1\}$ ，即约束了连通的参数空间，减少了参数空间的维数，使得  $SU(1)$  变成零维李群。

由于混合李群存在一个连通的不变子群，而该连通的不变子群的性质可由解析的组合函数局域地给出，因此李群的绝大多数性质可由单位元附近的局域性质给出。

### 简单李群的局域性质

1. 我们可将描述单位元的  $n$  个参数都取为零，即  $E = E(0, 0, \dots, 0)$ ；
2. 在单位元邻域的元素，可由无穷小元素刻画，即  $A = A(0, 0, \dots, \epsilon, \dots, 0)$ 。

简单起见，我们先考虑单参数（1 维）简单李群，多参数情况可做类似处理。

我们考虑单位元邻域的两个无穷小元素  $A(\alpha)$  和  $B(\beta)$ ，假设组合函数为  $f(\alpha, \beta)$ ，则

$$A(\alpha)B(\beta) = AB(f(\alpha, \beta)). \quad (3.11)$$

由于组合函数是解析的，可做泰勒级数展开，准至线性项有

$$f(\alpha, \beta) = f(0, 0) + \alpha \left. \frac{\partial f(\alpha, 0)}{\partial \alpha} \right|_{\alpha=0} + \beta \left. \frac{\partial f(0, \beta)}{\partial \beta} \right|_{\beta=0} + O(\epsilon^2). \quad (3.12)$$

现在考虑两个特殊情况，

$$A(\alpha)E(0) = A(f(\alpha, 0)), \quad E(0)B(\beta) = B(f(0, \beta)), \quad (3.13)$$

因此有

$$f(\alpha, 0) = \alpha, \quad f(0, \beta) = \beta, \quad (3.14)$$

即

$$\frac{\partial f(\alpha, 0)}{\partial \alpha} = \frac{\partial f(0, \beta)}{\partial \beta} = 1. \quad (3.15)$$

再利用

$$E(0)E(0) = E(f(0, 0)) = E(0) \Rightarrow f(0, 0) = 0, \quad (3.16)$$

得到  $f(\alpha, \beta) = \alpha + \beta + O(\epsilon^2)$ ，因此在准至线性项下，两个无穷小元素的乘积为

$$A(\alpha)B(\beta) = AB(\alpha + \beta), \quad (3.17)$$

即两个无穷小元素的乘积等于参数相加，并且是可以交换的

$$A(\alpha)B(\beta) = B(\beta)A(\alpha) \quad (3.18)$$

现在，我们将这个结果推广到  $n$  维简单李群  $G$ ，单位元为  $x(0, 0, \dots, 0)$ ，其邻域有元素  $x(0, 0, \dots, \epsilon_k, \dots, 0)$ ，则该邻域元素可由以下关系得到

$$x(0, 0, \dots, \epsilon_k, \dots, 0) = x(0, 0, \dots, 0) + i\epsilon_k J_k + O(\epsilon_k^2), \quad (3.19)$$

其中  $J_k \in G$  被称为李群  $G$  的第  $k$  个生成元, 其定义式为

$$J_k = \lim_{\epsilon_k \rightarrow 0} \frac{1}{i\epsilon_k} [x(0, 0, \dots, \epsilon_k, \dots, 0) - x(0, 0, \dots, 0)]. \quad (3.20)$$

以上的加减法实际上是李群作为微分流形上的切空间定义的的矢量加法。简单李群的  $n$  个生成元完全决定了李群的局域结构, 对于第  $k$  个方向的有限群元, 都能通过生成元  $J_k$  多次作用在单位元上构造, 即

$$\begin{aligned} x(0, 0, \dots, a_k, \dots, 0) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ x\left(0, 0, \dots, \frac{a_k}{N}, \dots, 0\right) \right]^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ x(0, 0, \dots, 0) + i \frac{a_k}{N} J_k \right]^N \\ &= x(0, 0, \dots, 0) \exp(i a_k J_k) \\ &= \exp(i a_k J_k), \end{aligned} \quad (3.21)$$

因此有限参数的群元由生成元的指数给出。对于任意有限群元, 则为

$$x(a_1, a_2, \dots, a_n) = \exp\left(i \sum_{k=1}^n a_k J_k\right), \quad (3.22)$$

因此生成元  $J_k$  给出简单李群的所有局域性质。

除了局域性质外, 李群(更一般为拓扑群)也具有全局性质, 这部分性质与李群的局域性质无关, 即可能存在具有相同局域性质的两个李群(相同的生成元), 但因其他性质不同, 导致具有不同的全局性质。这些全局性质不受局域变换的影响。

§ 定义 3.10. 拓扑 在数学里, 拓扑学 (Topology), 或意译为位相几何学, 主要研究空间内, 在连续变化(如拉伸或弯曲, 但不包括撕开或黏合)下维持不变的性质。

例 3.10. 描述凸多面体的面数  $F$ 、边数  $E$ 、顶点数  $V$  的欧拉定理:  $F + V - E = 2$ 。

如图3.3所示, 凸多面体均满足以上关系, 该常数也被称为欧拉示性数, 为不依赖于多面体细节的常数, 对于凸多面体该常数为 2。若将凸多面体改为有一个洞的多面体, 该常数将变为-2。欧拉示性数与多面体的洞数有一一对应关系, 为刻画多面体全局性质的一个不变量。

例 3.11. 高斯-博内 (Gauss-Bonnet) 定理: 对于紧致的二维封闭流形  $M$ , 其高斯曲率  $K$  在  $M$  上的面积分为

$$\int_M K dA = 2\pi\chi(M),$$

其中  $\chi(M) = 2 - 2g$  为欧拉示性数,  $g$  为流形  $M$  的亏格 (genus)。

高斯-博内定理是欧拉定理的推广, 常见的流形及其亏格见图3.4。在近年拓扑物理的研究中, 参数空间的高斯曲率, 即所谓贝里曲率是拓扑物态的重要概念。

亏格的概念与连通度相关, 这是拓扑群的一个重要的全局性质。

§ 定义 3.11. 多重连通群 简单群根据其参数空间的拓扑, 进一步分为单连通和多连通的。若任意群元在参数空间中的连通道路恰有  $k$  条, 并且它们不能通过在参数空间内部的连续形变而重合, 则称该群为  $k$  重连通。 $k$  称为连通度。

				
<b>Tetrahedron</b>	<b>Cube</b>	<b>Octahedron</b>	<b>Dodecahedron</b>	<b>Icosahedron</b>
F = 4	F = 6	F = 8	F = 12	F = 20
V = 4	V = 8	V = 6	V = 20	V = 12
E = 6	E = 12	E = 12	E = 30	E = 30
F + V - E = 2	F + V - E = 2	F + V - E = 2	F + V - E = 2	F + V - E = 2

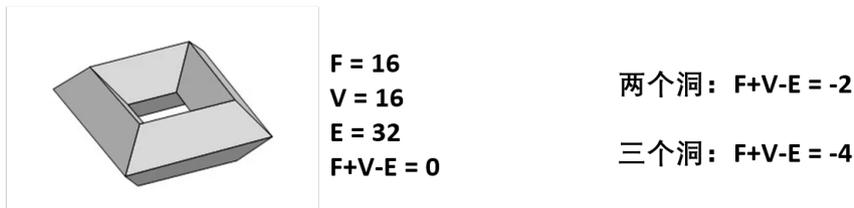


图 3.3: 凸多面体与有洞多面体所满足的欧拉定理。

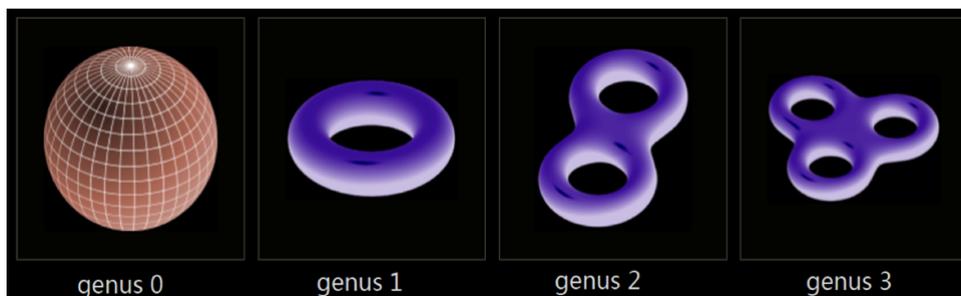


图 3.4: 流形的亏格。

单连通简单群参数空间如图3.5(a)所示，其中任意两个群元  $x_1$  和  $x_2$  之间的任一条连通道路可以通过连续形变变为另一条连通道路（拓扑学上称为伦移）。双连通简单群参数空间如图3.5(b)所示，此时参数空间有一个“洞”，因此连接任意两个群元间的道路被分为两类，而且这两类道路之间不能通过连续形变联系起来。四连通简单群参数空间如图3.5(c)所示，此时参数空间有两个“洞”。对于多连通李群，连接固定两点的道路可按照能否连续变化分组，同一组的道路可以相互连续变化（拓扑学上称为同伦。同伦的闭道路构成一个同伦类，对闭道路可引入乘法，则这些同伦类在该乘法下构成群，称为基本群或第一同伦群）。这些道路的组的数目，称为多连通李群的连通度，是李群的一个重要的整体性质。SU(2) 群是单连通群，而SO(2) 与  $n > 2$  的SO(n) 群都是多连通群。

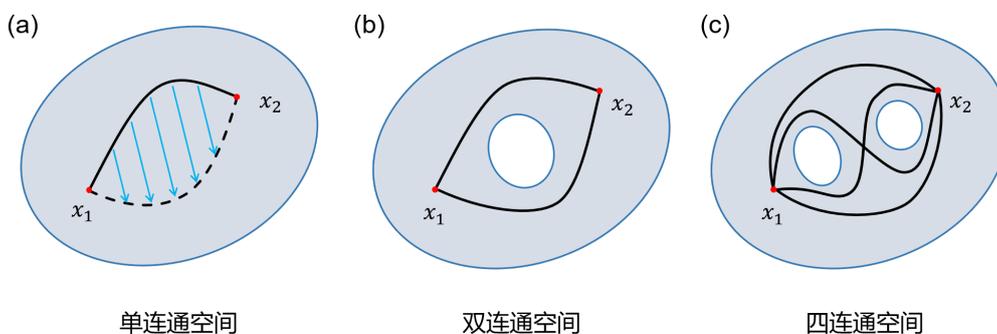


图 3.5: (a) 单连通群。(b) 双连通群。(c) 四连通群。

随着连通度的增加，简单群的一些结构性质会变得更复杂。然而实际上我们不需要直接研究多重连通的

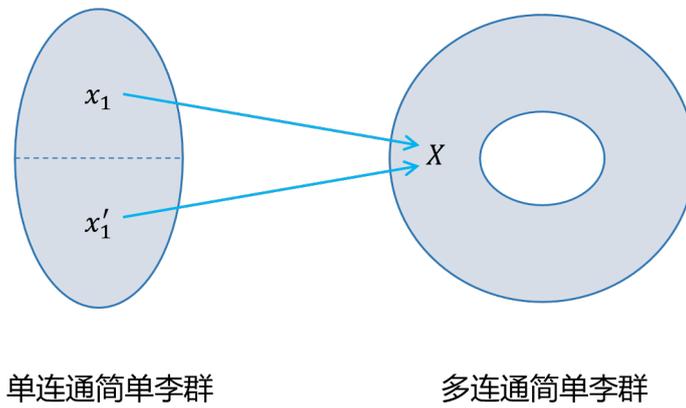


图 3.6: 单连通简单李群与多连通简单李群的同态关系。

简单群，而是可以先研究单连通的简单群，再找到单连通简单群和多重连通简单群的关系。二者存在以下关系。

§ 定义 3.12. 覆盖群 可以证明，当简单李群  $G$  的群空间连通度为  $n$  时，它一定同态于另一个群空间是单连通的简单李群，同态对应关系是  $1:n$ 。这个单连通的简单李群称为李群的覆盖群。

单连通简单李群和双连通简单李群的同态关系见图3.6。

例 3.12. 实数加群  $\{\mathbb{R}, +\}$  为单参数的、非紧致的、Abel 的、单连通的、简单的李群。

实数加群的参数空间为实轴，任意两点间只有一种连通方式，因此是单连通的。由于是 Abel 群，因此  $\{\mathbb{R}, +\}$  只有 1 维不等价不可约表示  $D_\tau$ ，满足  $D_\tau(\alpha) D_\tau(\beta) = D_\tau(\alpha + \beta)$ ，因此可取为

$$D_\tau(\alpha) = e^{-i\tau\alpha}, \tau \in \mathbb{C},$$

$\tau$  是标定不等价不可约表示的复数。

例 3.13.  $SO(2)$  群（即  $U(1)$  群）为单参数的、紧致的、Abel 的、无穷连通的、简单的李群。

$SO(2)$  群的群元  $C_k(\theta)$  仅由转角  $\theta$  一个连续参数刻画，其参数空间为  $[0, 2\pi] / (0 \sim 2\pi)$ ，或记为  $\mathbb{R} / (x \sim x + 2\pi)$ ，实际上为一维球面  $S^1$ （二维单位圆圆周），为紧致空间。 $SO(2)$  是连通群，而且连通度为无穷，因为 1 维球面上两个点可以有无限种连接方式（绕圆周 0 圈、1 圈、-5 圈等等），可如图3.7(a) 所示。事实上，由于  $U(n) = U(1) \otimes SU(n)$ ，所有  $U(n)$  群都是无穷度连通。

作为多连通群， $SO(2)$  的覆盖群为单连通的李群  $\{\mathbb{R}, +\}$ ，其同态映射关系如图3.7(b) 所示，将实轴卷曲并投影为 1 维球面，该投影实际上为同态映射  $p: [2\pi k, 2\pi k + 2\pi) \rightarrow [0, 2\pi] / (0 \sim 2\pi)$ ， $k \in \mathbb{Z}$ 。

因为  $SO(2)$  也是 Abel 群，仅有 1 维不等价不可约表示  $D_\tau(\alpha) = e^{-i\tau\alpha}$ ，需要满足

$$D_\tau(0) = D_\tau(2\pi) \rightarrow e^{i2\pi\tau} = 1,$$

这便约束了  $\tau$  仅能取整数。

我们常用的是  $SO(2)$  在  $\mathbb{R}^2$  下（以  $\{i, j\}$  为基）的表示

$$T(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \tag{3.23}$$

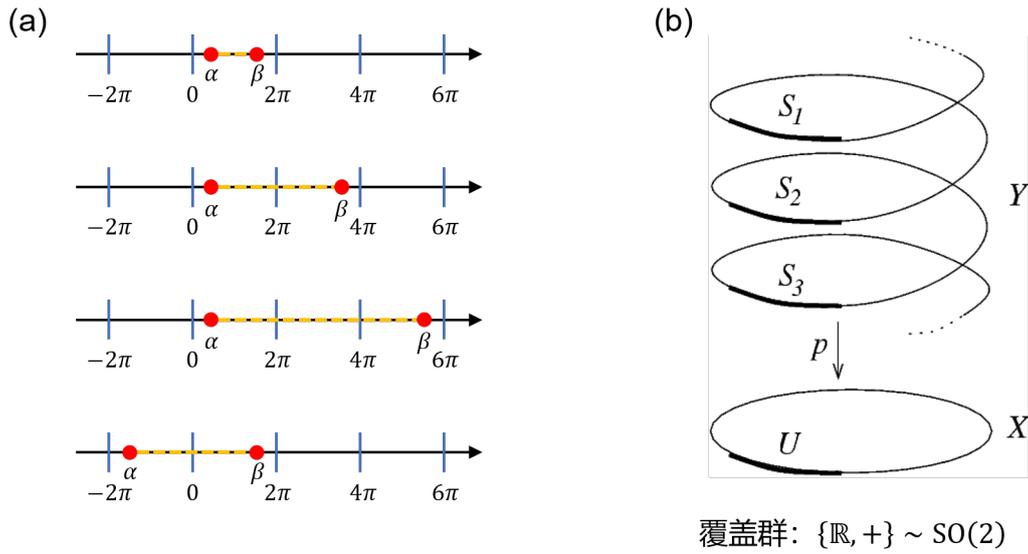


图 3.7: (a)  $SO(2)$  的无穷连通度。(b)  $SO(2)$  群的覆盖群为实数加群  $\{\mathbb{R}, +\}$ 。

显然为可约表示。现在考虑  $SO(2)$  在  $\mathbb{R}^2$  下的生成元，对于单参数李群只有一个生成元，根据生成元的定义 (3.20) 式，考虑无穷小转动  $\epsilon$ ，有

$$\begin{aligned}
 J &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{i\epsilon} \left[ \begin{pmatrix} \cos \epsilon & -\sin \epsilon \\ \sin \epsilon & \cos \epsilon \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} \right] \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{i\epsilon} \left[ \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon \\ \epsilon & 1 \end{pmatrix} - \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} + O(\epsilon^2) \right] \\
 &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \begin{pmatrix} 0 & i \\ -i & 0 \end{pmatrix} \\
 &= -\sigma_y,
 \end{aligned} \tag{3.24}$$

对于有限角度转动，其表示矩阵由生成元表示为

$$T(\theta) = e^{-i\theta\sigma_y} = I \cos \theta - i\sigma_y \sin \theta, \tag{3.25}$$

这里已使用泡利矩阵的关系

$$e^{i\theta(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma})} = I \cos \theta - i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \theta. \tag{3.26}$$

我们也可以写出函数变换下的生成元，取转轴为  $z$  轴， $T(\theta)$  对  $(x, y)$  平面上的函数  $f(x, y)$  的转动为

$$\begin{aligned}
 T(\theta) f(x, y) &= f(C_{\mathbf{k}}(-\theta) \mathbf{r}) \\
 &= f \left( \begin{pmatrix} \cos \theta & \sin \theta \\ -\sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \end{pmatrix} \right) \\
 &= f(x \cos \theta + y \sin \theta, -x \sin \theta + y \cos \theta),
 \end{aligned} \tag{3.27}$$

考虑无穷小转动  $\epsilon$ , 有

$$\begin{aligned} Jf(x, y) &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{i\epsilon} [f(x \cos \epsilon + y \sin \epsilon, -x \sin \epsilon + y \cos \epsilon) - f(x, y)] \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{i\epsilon} \left[ \epsilon y \frac{\partial f(x, y)}{\partial x} - \epsilon x \frac{\partial f(x, y)}{\partial y} \right] \\ &= i \left( x \frac{\partial}{\partial y} - y \frac{\partial}{\partial x} \right) f(x, y) \\ &= -\frac{\hat{L}_z}{\hbar} f(x, y), \end{aligned} \quad (3.28)$$

因此, 无穷小转动在函数基下以角动量算符为生成元。

以上两种写成生成元的过程适合给定表示空间的情况。一般若不给定特定表示空间, 可以利用  $\text{SO}(n)$  群由  $n$  阶矩阵构成的性质, 写出这个矩阵表示 (即自身表示) 的生成元。对于  $\text{SO}(n)$  群, 需要满足  $R^T R = I_n$ , 考虑单位元邻域的无穷小变换  $R(\epsilon) = I_n + \epsilon A$ ,  $\epsilon$  是小量,  $A$  是一个  $n$  阶矩阵, 则

$$\begin{aligned} R^T R &= (I_n + \epsilon A)^T (I_n + \epsilon A) \\ &= I_n + (A^T + A) \epsilon + O(\epsilon^2) \\ &= I_n, \end{aligned} \quad (3.29)$$

因此准至  $\epsilon$  的线性项, 矩阵  $A$  需要满足性质  $A^T = -A$ , 因此  $A$  是反对称矩阵。

1.  $\text{SO}(2)$  群: 只有一个线性无关的 2 阶反对称矩阵, 即 1 个生成元, 取为

$$J = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = -i\sigma_y, \quad (3.30)$$

有限转动为

$$\begin{aligned} R(\theta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ R\left(\frac{\theta}{N}\right) \right]^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left( I_n + \frac{\theta}{N} J \right)^N \\ &= \exp(\theta J) \\ &= \exp(-i\sigma_y \theta). \end{aligned} \quad (3.31)$$

2.  $\text{SO}(3)$  群: 存在三个线性无关的 3 阶反对称矩阵, 即 3 个生成元, 取为

$$J_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad J_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad J_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}. \quad (3.32)$$

3.  $\text{SO}(n)$  群: 一共存在  $1 + 2 + \dots + (n-1)$  个线性无关的  $n$  阶反对称矩阵, 因此有  $n(n-1)/2$  个生成元, 与之前得出的  $\dim \text{SO}(n) = n(n-1)/2$  相同。这些生成元是海森堡表象的生成元。

事实上, 一维连通李群必是 Abel 群, 且仅有两种: 即实数加群和  $\text{SO}(2)$  群 (即  $\text{U}(1)$  群)。可以证明, 任意连通 Abel 李群必然是上述两种群的直积。

在熟悉了定轴转动群  $\text{SO}(2)$  后, 我们关注更重要的  $\text{SO}(3)$  群。

### 3.2 三维转动群 $SO(3)$

前面提到,  $SO(3)$  是  $O(3)$  中行列式为 1 的连通片, 是  $O(3)$  的不变子群, 并且可以描述三维欧氏空间的旋转变换。 $SO(3)$  中的矩阵除了不改变手性外, 还与旋转变换有更深层的联系。

■ **定理 3.2.** 对  $\forall g \in SO(3)$ , 可在  $\mathbb{R}^3$  中找到一个向量  $\mathbf{k}$ , 使得  $g\mathbf{k} = \mathbf{k}$ 。

证明. 为了证明总存在  $\mathbf{k}$  满足  $(g - E)\mathbf{k} = \mathbf{0}$ , 我们需要证明  $\forall g \in SO(3)$ , 都有  $\det(g - E) = 0$ 。

我们考虑  $\det(g - E)^T = \det(g^T - E) = \det(g^{-1} - E)$ , 因为

$$g^{-1} - E = g^{-1}E(E - g) = g^{-1}(-E)(g - E), \quad (3.33)$$

所以

$$\begin{aligned} \det(g^{-1} - E) &= \det[g^{-1}(-E)(g - E)] \\ &= \det g^{-1} \det(-E) \det(g - E) \\ &= -\det(g - E), \end{aligned} \quad (3.34)$$

而  $\det(g - E)^T = \det(g - E)$ , 所以  $\det(g - E) = -\det(g - E)$ , 即  $\det(g - E) = 0$ , 所以总能找到  $(g - E)\mathbf{k} = \mathbf{0}$  的非零解。□

因此, 对于  $SO(3)$  的任一个群元  $g$ , 都能找到  $g$  作用后不变的矢量, 该矢量就为转轴, 因此  $SO(3)$  的任意群元也能表示为  $g = C_{\mathbf{k}}(\theta)$ 。取与  $\mathbf{k}$  正交的两个单位矢量为  $\mathbf{i}$  和  $\mathbf{j}$ , 建立基  $\{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}\}$ , 在这组基下, 群元表示为

$$g = C_{\mathbf{k}}(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad (3.35)$$

特征标为  $\chi = 1 + 2\cos \theta$ , 并且特征标不随基变换而改变。考虑另一组基  $\{\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}'\}$ , 它与原来的基相差正交变换  $Q$ , 即

$$(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) = (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') Q, \quad (3.36)$$

考虑

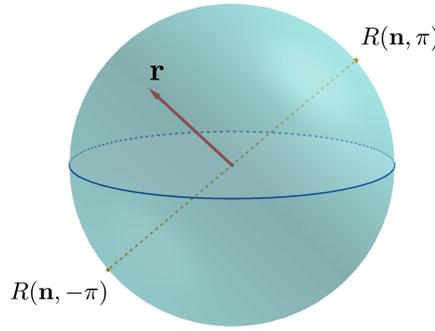
$$\mathbf{r} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad (3.37)$$

$C_{\mathbf{k}}(\theta)$  将  $\mathbf{r}$  变为  $\mathbf{r}'$ , 即

$$\mathbf{r}' = C_{\mathbf{k}}(\theta) \mathbf{r} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta & 0 \\ \sin \theta & \cos \theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix} = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) A \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (3.38)$$

而又因为

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = Q \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

图 3.8:  $SO(3)$  群参数空间。

所以

$$\mathbf{r}' = (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') Q A Q^{-1} \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix}, \quad (3.40)$$

因此  $g = C_{\mathbf{k}}(\theta)$  在新基下的表示矩阵为  $Q A Q^{-1}$ , 而  $\text{tr} Q A Q^{-1} = \text{tr} A = 1 + 2 \cos \theta$ , 因此  $SO(3)$  群元在  $\mathbb{R}^3$  中的特征标只与转角有关。

这个结果意味着  $SO(3)$  中绕不同轴旋转相同角  $\theta$  的变换为同类元素, 即  $\forall g \in SO(3)$ , 因为  $C_{\mathbf{k}}(\theta) \mathbf{k} = \mathbf{k}$ , 所以

$$g C_{\mathbf{k}}(\theta) \mathbf{k} = g \mathbf{k} = [g C_{\mathbf{k}}(\theta) g^{-1}] g \mathbf{k}, \quad (3.41)$$

意味着  $g C_{\mathbf{k}}(\theta) g^{-1}$  是保持  $\mathbf{k}' = g \mathbf{k}$  不变的操作, 因此有

$$g C_{\mathbf{k}}(\theta) g^{-1} = C_{g \mathbf{k}}(\theta). \quad (3.42)$$

此结论对点群, 即  $SO(3)$  的子群不一定成立, 因为联系不同转轴的操作不一定在点群中, 所以不同转轴不一定为等价轴。

现在我们考虑  $SO(3)$  群参数空间。有时也将转动操作记为  $R(\mathbf{n}, \phi) = C_{\mathbf{n}}(\phi)$ ,  $\phi \in [0, 2\pi] / (0 \sim 2\pi)$ 。单位矢量  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\alpha, \beta)$  描述转轴方向, 即

$$\mathbf{n}(\alpha, \beta) = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta), \quad (3.43)$$

需要用到两个参数, 其范围分别为  $\alpha \in [0, 2\pi]$ ,  $\beta \in [0, \pi]$ 。实际上, 旋转操作还满足以下性质:

$$R(\mathbf{n}, \phi) = R(-\mathbf{n}, 2\pi - \phi), \quad R(\mathbf{n}, \pi) = R(-\mathbf{n}, \pi). \quad (3.44)$$

有了第一个性质, 我们只需考虑转角为  $\phi \in [0, \pi]$  即可, 而第二个性质告诉我们绕轴的正方向和反方向旋转  $\pi$  是同一操作 (二次轴无方向之分)。因此  $SO(3)$  的参数空间为一个三维球体, 其方向矢量  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{n}$  表示转轴, 模  $r = \phi$  为转角, 并且球体的半径为  $\pi$ , 并且球面上与直径相交的两点等价, 称为**对径认同**, 也被称为三维实射影空间, 如图3.8所示。

实际上,  $SO(3)$  群为三参数、紧致、连续、简单、非 Abel、双连通简单李群。其双重连通度如图3.9所示, 参数空间任意两点  $A, B$  可以如图3.9(a) 直接连接, 也可以如图3.9(b) 以球面上两点跳跃一次后连接。实际上, 偶数次跳跃情况可经由如图3.9(c)-(d)-(a) 的连续形变退化为直接连接情况, 而奇数次跳跃情况可类似退化为跳跃一次的情况。因此,  $SO(3)$  群为双连通李群, 对应于偶数次跳跃和奇数次跳跃的连通道路。事实上, 所有  $n > 2$  的  $SO(n)$  群都是双连通群。

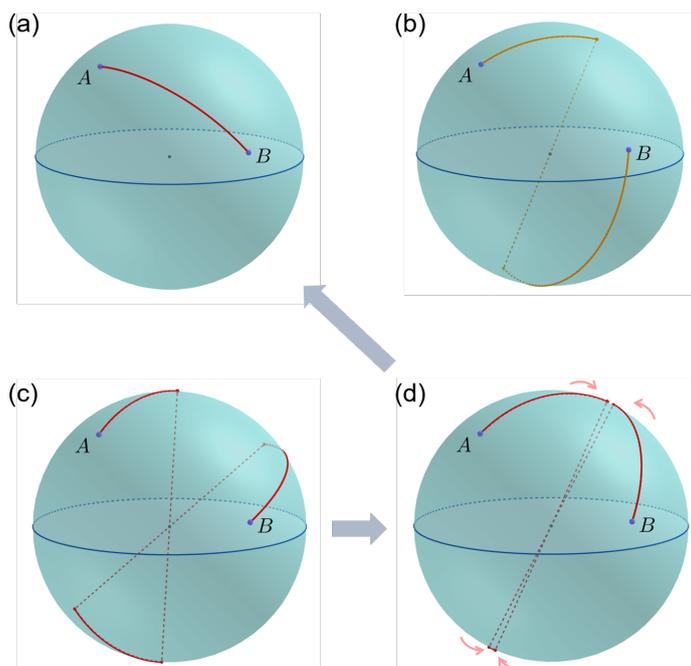


图 3.9:  $SO(3)$  群双重连通度示意图。参数空间中任意两点  $A, B$  可以直接连接 (a), 也可以从  $A$  先连至球面一点, 跳转至其对径等价点后再连至  $B$  点 (b)。任意偶数次跳转可以经由连续形变 (c)、(d), 从而退化为不跳转的情况 (a)。

在表示  $SO(3)$  群的参数空间时, 我们选取描写转轴角度的  $(\alpha, \beta)$  及描述转角的  $\phi$  作为三个连续参数, 描述  $SO(3)$  群的三个参数并不唯一, 欧拉角便是另一套刻画  $SO(3)$  群的参数, 而且采用欧拉角更方便计算  $SO(3)$  群的表示。

设  $Oxyz$  是三维欧式空间中固定的笛卡儿坐标系,  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  是  $SO(3)$  群中的元素, 它可以表示为三个连续转动的乘积。这三个连续转动的定义是: (如图3.10所示)

1. 先绕  $z$  轴转  $\alpha$  角,  $0 \leq \alpha < 2\pi$ , 此时坐标系由  $Oxyz$  变为  $Ox'y'z'$ ;
2. 再绕  $y'$  轴转  $\beta$  角,  $0 \leq \beta \leq \pi$ , 此时  $Ox'y'z'$  变为  $Ox''y''z''$ ;
3. 最后绕  $z''$  轴转  $\gamma$  角,  $0 \leq \gamma < 2\pi$ , 此时  $Ox''y''z''$  变为  $Ox'''y'''z'''$ 。

因此, 旋转操作表示为

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = C_{z''}(\gamma) C_{y'}(\beta) C_z(\alpha). \tag{3.45}$$

在  $Oxyz$  中分别写出三个操作的表示矩阵。

1. 在  $Oxyz$  中写出  $C_z(\alpha)$ : 该表示矩阵为

$$C_z(\alpha) = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = Q_3(\alpha). \tag{3.46}$$

2. 在  $Oxyz$  中写出  $C_{y'}(\beta)$ : 先在  $Ox'y'z'$  中写出  $C'_{y'}(\beta)$ , 为

$$C'_{y'}(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} = Q_2(\beta), \tag{3.47}$$

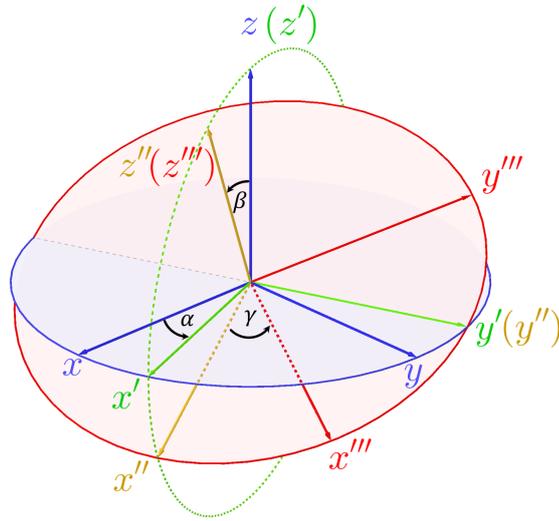


图 3.10: 欧拉角示意图。

再将  $Ox'y'z'$  转换至  $Oxyz$ , 基变换为

$$\begin{aligned} (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) Q_3(\alpha), \end{aligned} \quad (3.48)$$

因此在  $Oxyz$  中  $C_{y'}(\beta)$  的矩阵表示为

$$C_{y'}(\beta) = Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3^{-1}(\alpha). \quad (3.49)$$

3. 在  $Ox''y''z''$  中写出  $C_{z''}(\gamma)$ : 首先在  $Ox''y''z''$  写出  $C_{z''}(\gamma)$ , 即

$$C_{z''}(\gamma) = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = Q_3(\gamma), \quad (3.50)$$

将  $Ox''y''z''$  转换至  $Oxyz$ , 基变换为

$$\begin{aligned} (\mathbf{i}'', \mathbf{j}'', \mathbf{k}'') &= (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') Q_2(\beta) \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) Q_3(\alpha) Q_2(\beta), \end{aligned} \quad (3.51)$$

因此在  $Oxyz$  中  $C_{z''}(\gamma)$  的矩阵表示为

$$C_{z''}(\gamma) = Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3(\gamma) Q_2^{-1}(\beta) Q_3^{-1}(\alpha). \quad (3.52)$$

综上, 写出欧拉角描述的  $SO(3)$  群元为

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= C_{z''}(\gamma) C_{y'}(\beta) C_z(\alpha) \\ &= Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3(\gamma) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.53)$$

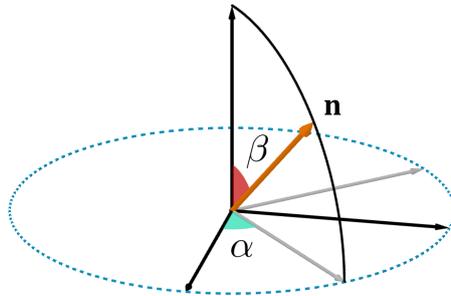
展开即为

$$R(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \alpha \cos \beta \cos \gamma - \sin \alpha \sin \gamma & -\cos \alpha \cos \beta \sin \gamma - \sin \alpha \cos \gamma & \cos \alpha \sin \beta \\ \sin \alpha \cos \beta \cos \gamma + \cos \alpha \sin \gamma & -\sin \alpha \cos \beta \sin \gamma + \cos \alpha \cos \gamma & \sin \alpha \sin \beta \\ -\sin \beta \cos \gamma & \sin \beta \sin \gamma & \cos \beta \end{pmatrix}. \quad (3.54)$$

从这个矩阵形式可以看出,  $\beta = 0$  时,  $R(\alpha, 0, \gamma) = Q_3(\alpha + \gamma)$ , 即  $\alpha + \gamma$  相同对应于同一转动;  $\beta = \pi$  时,  $R(\alpha, \pi, \gamma) = Q_3(\alpha - \gamma)$ ,  $\alpha - \gamma$  相同对应于同一转动。并且此时的转动操作是可对易的, 即  $SO(3)$  群的非 Abel 性质反映在  $Q_2(\beta)$  上。

实际上,  $R(\mathbf{n}, \phi)$  和  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  两种描写  $SO(3)$  群元的方式各有优劣。利用欧拉角  $R(\alpha, \beta, \gamma)$ , 任意转动操作只需三个矩阵描述即可。相反, 若采用  $R(\mathbf{n}, \phi)$ , 则需要使用五个矩阵来表示一个转动操作。这是因为绕  $\mathbf{n}$  轴的旋转可以被拆分为先以  $\mathbf{n}$  建立笛卡儿坐标系  $Ox'y'z'$ , 且  $\mathbf{n}$  为  $z'$  轴方向, 此时的转动矩阵为

$$C'_{z'}(\phi) = \begin{pmatrix} \cos \phi & -\sin \phi & 0 \\ \sin \phi & \cos \phi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = Q_3(\phi) = R(\hat{z}, \phi). \quad (3.55)$$



然后再在  $Oxyz$  中写出  $C_{z'}(\phi)$ , 因为  $\mathbf{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta)$ , 所以基变换实际为欧拉角的前两步, 即

$$\begin{aligned} (\mathbf{i}', \mathbf{j}', \mathbf{k}') &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) C_{y'}(\beta) C_z(\alpha) \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3^{-1}(\alpha) Q_3(\alpha) \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) Q_3(\alpha) Q_2(\beta) \\ &= (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) S. \end{aligned} \quad (3.56)$$

因此

$$\begin{aligned} R(\mathbf{n}, \phi) &= SR(\hat{z}, \phi)S^{-1} \\ &= Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3(\phi) Q_2^{-1}(\beta) Q_3^{-1}(\alpha), \end{aligned} \quad (3.57)$$

即  $R(\mathbf{n}, \phi)$  的表示需要使用五个矩阵计算, 因此采用欧拉角更方便计算  $SO(3)$  群元间的作用关系。

然而, 虽然  $R(\alpha, \beta, \gamma)$  更方便计算, 但三个角度的定义不如  $R(\mathbf{n}, \phi)$  的直观, 在求解物理问题上采用  $R(\mathbf{n}, \phi)$  将给出更为直观的理解方式, 因为  $\mathbf{n}$  给出主轴的方向, 因此在物理推导中更为常见。下面, 我们使用  $R(\mathbf{n}, \phi)$  在求出  $SO(3)$  群在不同表示空间下的生成元。

- 函数空间 (薛定谔表象)

我们考虑  $R(\mathbf{n}, \phi)$  在函数空间  $\{f(\mathbf{r})\}$  中的表示, 相应的函数变换算符为  $P(\mathbf{n}, \phi) = P_S P(\hat{z}, \phi) P_S^{-1}$ 。我们曾求出  $SO(2)$  中有限角度转动的函数空间表示可由相应的生成元表示, 即

$$\begin{aligned} P(\hat{z}, \phi) f(\mathbf{r}) &= \lim_{N \rightarrow \infty} P^N \left( \hat{z}, \frac{\phi}{N} \right) f(\mathbf{r}) \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 - i \frac{\phi}{N} \frac{L_z}{\hbar} \right]^N f(\mathbf{r}) \\ &= \exp \left( -\frac{i}{\hbar} L_z \phi \right) f(\mathbf{r}). \end{aligned} \quad (3.58)$$

所以  $P(\mathbf{n}, \phi)$  为

$$\begin{aligned} P(\mathbf{n}, \phi) &= P_S P(\hat{z}, \phi) P_S^{-1} \\ &= P_S \exp \left( -\frac{i}{\hbar} L_z \phi \right) P_S^{-1} \\ &= P_S \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 - i \frac{\phi}{N} \frac{L_z}{\hbar} \right]^N P_S^{-1} \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ 1 - i \frac{\phi}{N} \frac{P_S L_z P_S^{-1}}{\hbar} \right]^N \\ &= \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \phi P_S L_z P_S^{-1} \right). \end{aligned} \quad (3.59)$$

因为  $S = Q_3(\alpha) Q_2(\beta)$ , 所以

$$P_S = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \beta L_y \right), \quad (3.60)$$

再利用算符公式

$$e^A B e^{-A} = B + [A, B] + \frac{1}{2!} [A, [A, B]] + \cdots, \quad (3.61)$$

得到

$$\begin{aligned} P_S L_z P_S^{-1} &= \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \beta L_y \right) L_z \exp \left( \frac{i}{\hbar} \beta L_y \right) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) \\ &= \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) (\cos \beta L_z + \sin \beta L_x) \exp \left( \frac{i}{\hbar} \alpha L_z \right) \\ &= \sin \beta \cos \alpha L_x + \sin \beta \sin \alpha L_y + \cos \beta L_z \\ &= \mathbf{n} \cdot \mathbf{L}, \end{aligned} \quad (3.62)$$

其中已利用角动量对易关系  $[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$ 。最终得到绕任意轴  $\mathbf{n}$  转动操作在函数空间的表示为

$$P(\mathbf{n}, \phi) = \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{L} \right), \quad (3.63)$$

三个生成元为

$$\begin{aligned} J_k &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{1}{i\phi} \left[ \exp \left( -\frac{i}{\hbar} \phi L_k \right) - 1 \right] \\ &= \lim_{\phi \rightarrow 0} \frac{1}{i\phi} \left( -\frac{i}{\hbar} \phi L_k \right) \\ &= -\frac{L_k}{\hbar}. \end{aligned} \quad (3.64)$$

所以  $SO(3)$  群在函数空间（薛定谔表象）的生成元为  $(J_x, J_y, J_z)$ ，并且  $(J_x, J_y, J_z)$  构成（局域）线性空间。而  $O(3)$  群则在不变子群三个生成元的基础上，加上陪集代表元空间反演操作  $I$ ，因此有四个生成元  $(J_x, J_y, J_z, I)$ ，注意  $I$  不是无穷小变换的生成元，因为从单位元  $E$  出发无法通过一系列无穷小变换到达空间反演操作  $I$ ，因此  $O(3)$  群是 3 维李群。

实际上  $(J_x, J_y, J_z)$  不仅张成 3 维线性空间  $L$ ，在此线性空间  $L$  上还可以定义称为李括号的二元运算  $[\cdot, \cdot]$ ，对  $\forall x_i, x_j \in L$ ，满足

$$[x_i, x_j] \in L, [x_i, x_j] = -[x_j, x_i], \quad (3.65)$$

定义了李括号的线性空间，则被称为李代数。实际上，角动量的反对易关系  $[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$  定义了  $SO(3)$  的李代数。李代数的一个矩阵表示，能生成一个李群表示。

- 自身表示（海森堡表象）

单位元邻域无穷小变换为  $I_3 + \epsilon A$ ，而任意三阶反对称矩阵  $A^T = -A$  由三个线性无关的反对称矩阵表示，取为

$$T_1 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, T_2 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & i \\ 0 & 0 & 0 \\ -i & 0 & 0 \end{pmatrix}, T_3 = \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (3.66)$$

三个生成元可以通过绕三个方向的无穷小转动得到，如

$$R(\hat{z}, \epsilon) = \begin{pmatrix} 1 & -\epsilon & 0 \\ \epsilon & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = I_3 - i\epsilon T_3. \quad (3.67)$$

绕  $z$  轴的有限转动为

$$R(\hat{z}, \phi) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( I_3 - i \frac{\phi}{N} T_3 \right)^N = e^{-i\phi T_3}. \quad (3.68)$$

因此绕任意轴  $\mathbf{n}$  旋转的操作为

$$R(\mathbf{n}, \phi) = S R(\hat{z}, \phi) S^{-1} = \exp(-i\phi S T_3 S^{-1}). \quad (3.69)$$

代入  $S = Q_3(\alpha) Q_2(\beta)$ ，得

$$S T_3 S^{-1} = \begin{pmatrix} 0 & -i \cos \beta & i \sin \beta \sin \alpha \\ i \cos \beta & 0 & -i \sin \beta \cos \alpha \\ -i \sin \beta \sin \alpha & i \sin \beta \cos \alpha & 0 \end{pmatrix} = \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}, \quad (3.70)$$

因此任意转动在  $\mathbb{R}^3$  中的表示为

$$R(\mathbf{n}, \phi) = \exp(-i\phi \mathbf{n} \cdot \mathbf{T}). \quad (3.71)$$

因此，总结而言， $SO(3)$  群的三个生成元可由绕三个方向的无穷小转动求出，在函数空间为角动量  $(L_x, L_y, L_z)$ ，在  $\mathbb{R}^3$  空间为三个线性无关的反对称矩阵  $(T_1, T_2, T_3)$ ，即角动量算符在  $\mathbb{R}^3$  空间的表示矩阵。

现在我们看  $SO(3)$  群的不可约表示。对于李群和李代数，存在一个特殊的不变量，称为 Casimir 不变量（算符），它与任意生成元的李括号都为零  $[C, L_i] = 0$ ，在  $SO(3)$  群和  $so(3)$  李代数中，该 Casimir 算符为  $L^2 = L_x^2 + L_y^2 + L_z^2$ 。Casimir 算符的本征值可以标定李群的不可约表示， $L^2$  的本征值为  $\ell(\ell+1)\hbar^2$ ， $\ell \in \mathbb{Z}^+$  为角动量量子数，对应的本征函数为球谐函数

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (3.72)$$

其中  $P_\ell^m(x)$  为缔合勒让德多项式,  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$  为磁量子数。  $L^2$  的本征方程为

$$L^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi). \quad (3.73)$$

接下来, 我们写出函数变换算符  $P(\mathbf{n}, \phi)$  在球谐函数空间  $\{Y_\ell^m(\theta, \varphi) | \ell \in \mathbb{Z}^+, m = -\ell, \dots, \ell\}$  的表示矩阵。由于  $[L^2, L_i] = 0$ , 即任意转动  $P(\mathbf{n}, \phi)$  的表示也与  $L^2$  对易  $[P(\mathbf{n}, \phi), L^2] = 0$ , 因此  $P(\mathbf{n}, \phi)$  与  $L^2$  具有共同本征值, 因为

$$L^2 [P(\mathbf{n}, \phi) Y_\ell^m(\theta, \varphi)] = P(\mathbf{n}, \phi) L^2 Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \ell(\ell + 1) \hbar^2 [P(\mathbf{n}, \phi) Y_\ell^m(\theta, \varphi)], \quad (3.74)$$

所以  $P(\mathbf{n}, \phi) Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  也是  $L^2$  具有本征值  $\ell(\ell + 1) \hbar^2$  的本征态, 因此可用  $\{Y_\ell^m(\theta, \varphi) | m = -\ell, \dots, \ell\}$  展开, 即

$$P(\mathbf{n}, \phi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) = \sum_{m'=-\ell}^{\ell} A_{m'm}^\ell(\mathbf{n}, \phi) Y_\ell^{m'}(\theta, \varphi), \quad (3.75)$$

$A^\ell$  便是  $SO(3)$  群的第  $\ell$  个表示, 是一个  $2\ell + 1$  维的表示。

表示矩阵的具体形式会在之后给出, 我们先关注表示的特征标。由于特征标是类函数, 而绕不同转轴旋转相同角度的转动操作等价, 因此对于任意  $P(\mathbf{n}, \phi)$ , 只要考虑其同类元素  $P(\hat{z}, \phi)$  的特征标即可。  $(\theta, \varphi)$  为单位向量  $\hat{\mathbf{r}}$  的球坐标表示,  $P(\hat{z}, \phi)$  对  $Y_\ell^m(\theta, \varphi)$  的作用等同于  $R^{-1}(\hat{z}, \phi)$  对  $(\theta, \varphi)$  的作用, 即

$$\begin{aligned} P(\hat{z}, \phi) Y_\ell^m(\theta, \varphi) &= Y_\ell^m(R^{-1}(\hat{z}, \phi)(\theta, \varphi)) \\ &= Y_\ell^m((\theta, \varphi - \phi)) \\ &= P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi} e^{-im\phi} \\ &= e^{-im\phi} Y_\ell^m(\theta, \varphi), \end{aligned} \quad (3.76)$$

因此,  $P(\hat{z}, \phi)$  的表示矩阵为对角矩阵

$$A^\ell(\hat{z}, \phi) = \begin{pmatrix} e^{i\ell\phi} & & & & \\ & e^{i(\ell-1)\phi} & & & \\ & & \ddots & & \\ & & & e^{-i(\ell-1)\phi} & \\ & & & & e^{-i\ell\phi} \end{pmatrix}, \quad (3.77)$$

即特征标为

$$\begin{aligned} \chi^\ell(\phi) &= \sum_{m=-\ell}^{\ell} e^{-im\phi} \\ &= \frac{e^{-i\ell\phi} - e^{i(\ell+1)\phi}}{1 - e^{i\phi}} \\ &= \frac{e^{-i(\ell+1/2)\phi} - e^{i(\ell+1/2)\phi}}{e^{-i\phi/2} - e^{i\phi/2}} \\ &= \frac{\sin[(\ell + 1/2)\phi]}{\sin(\phi/2)}, \end{aligned} \quad (3.78)$$

或者可以进一步展开为

$$\begin{aligned}
 \chi^\ell(\phi) &= \frac{\sin[(\ell + 1/2)\phi]}{\sin(\phi/2)} \\
 &= \frac{\sin[(\ell - 1/2)\phi]}{\sin(\phi/2)} + 2\cos\ell\phi \\
 &= \frac{\sin[(\ell - 3/2)\phi]}{\sin(\phi/2)} + 2\cos(\ell - 1)\phi + 2\cos\ell\phi \\
 &= 1 + 2\cos\phi + 2\cos 2\phi + \cdots + 2\cos\ell\phi.
 \end{aligned} \tag{3.79}$$

当  $\ell = 1$  时,  $\chi^{\ell=1}(\phi) = 1 + 2\cos\phi$  与之前  $\mathbb{R}^3$  的结果一致。当  $\ell$  走遍所有非负整数时,  $A^\ell$  给出  $SO(3)$  群的所有不等价不可约表示。

### 3.3 二维幺模酉矩阵群 $SU(2)$

现在, 我们关注另一个常见的  $SU(2)$  群, 即由所有行列式为 1 的 2 阶酉矩阵组成的群。对于  $\forall u \in SU(2)$ , 可以参数化的写出群元为

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix}, \quad a, b, c, d \in \mathbb{C}. \tag{3.80}$$

根据酉矩阵的定义, 有

$$uu^\dagger = \begin{pmatrix} a & b \\ c & d \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & c^* \\ b^* & d^* \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} |a|^2 + |b|^2 & ac^* + bd^* \\ a^*c + b^*d & |c|^2 + |d|^2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

再由行列式  $\det u = ad - bc = 1$ , 因此有  $c = -b^*$ ,  $d = a^*$ , 所以

$$u = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix}, \quad |a|^2 + |b|^2 = 1, \tag{3.81}$$

因此刻画每个  $SU(2)$  群群元需要 3 个实参数。

先求出  $SU(2)$  群的三个生成元。令无穷小变换为  $u(\epsilon) = I_2 + \epsilon A$ ,  $A$  为 2 阶矩阵, 利用酉矩阵的性质有

$$\begin{aligned}
 u^\dagger u &= (I_2 + \epsilon A)^\dagger (I_2 + \epsilon A) \\
 &= I_2 + \epsilon (A^\dagger + A) + O(\epsilon^2) \\
 &= I_2,
 \end{aligned} \tag{3.82}$$

因此有  $A^\dagger = -A$ , 显然任意的反厄密矩阵  $A$  都能写为  $A = -iB$ , 其中  $B^\dagger = B$  为厄密矩阵。因此无穷小变换也能写作  $u(\epsilon) = I_2 - i\epsilon B$ 。而有限变换的群元为

$$u(\theta) = \lim_{N \rightarrow \infty} \left( I_2 - i \frac{\theta}{N} B \right)^N = \exp(-i\theta B). \tag{3.83}$$

注意到行列式为 1 对厄密矩阵  $B$  有额外要求, 即

$$\det u(\theta) = \det [\exp(-i\theta B)] = \exp(-i\theta \operatorname{tr} B) = 1, \tag{3.84}$$

因此需要满足  $\operatorname{tr} B = 0$  (此矩阵指数公式可用雅可比公式证明)。可以写出三个线性无关的 2 阶零迹厄密矩阵为

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \tag{3.85}$$

因此泡利矩阵为  $SU(2)$  群的生成元。 $SU(2)$  群的李代数  $\mathfrak{su}(2)$  为  $[\sigma_i, \sigma_j] = 2i \sum_k \varepsilon_{ijk} \sigma_k$ , 与  $\mathfrak{so}(3)$  李代数  $[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k$  具有相同的代数关系 (只相差一个系数), 由于李群的局域结构由李代数决定, 因此  $SU(2)$  群和  $SO(3)$  群的局域结构是相同的 (局域同构), 但是前者是单连通而后者是双连通的, 因此虽然李代数是相同的, 二者的全局结构 (拓扑) 是不同的。

现在我们来构建  $SU(2)$  群和  $SO(3)$  群的联系。注意到任意一个二阶零迹厄密矩阵都能用泡利矩阵展开, 即

$$h = \begin{pmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{pmatrix} = X\sigma_x + Y\sigma_y + Z\sigma_z = \mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.86)$$

其中  $X, Y, Z \in \mathbb{R}$ 。以任意  $u \in SU(2)$  对  $h$  作相似变换  $u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1}$ , 注意到

$$[u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1}]^\dagger = (u^{-1})^\dagger (\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})^\dagger u^\dagger = u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1},$$

因此  $u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1}$  也是厄密的, 且相似变换不改变迹, 因此  $u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1}$  也是二阶零迹厄密矩阵, 所以可将之表示为

$$u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1} = X'\sigma_x + Y'\sigma_y + Z'\sigma_z = \mathbf{r}' \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.87)$$

更重要的是, 该变换保持行列式不变, 即

$$\det h = X^2 + Y^2 + Z^2 = X'^2 + Y'^2 + Z'^2. \quad (3.88)$$

因此一个  $SU(2)$  群的元素  $u$ , 对应于一个  $\mathbb{R}^3$  中的正交变换  $R_u \in O(3)$ , 满足  $R_u: \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$ ,  $|\mathbf{r}| = |\mathbf{r}'|$ 。因此该关系也能写为

$$u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1} = (R_u \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (3.89)$$

以  $u$  的矩阵形式 (3.81) 式代入, 则有

$$\begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} Z & X - iY \\ X + iY & -Z \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a^* & -b \\ b^* & a \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} Z' & X' - iY' \\ X' + iY' & -Z' \end{pmatrix}. \quad (3.90)$$

对比后可得

$$\begin{pmatrix} X' \\ Y' \\ Z' \end{pmatrix} = R_u \begin{pmatrix} X \\ Y \\ Z \end{pmatrix},$$

其中

$$R_u = \begin{pmatrix} \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} - b^2 - b^{*2}) & -\frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} + b^2 - b^{*2}) & -(ab + a^*b^*) \\ \frac{i}{2}(a^2 - a^{*2} - b^2 + b^{*2}) & \frac{1}{2}(a^2 + a^{*2} + b^2 + b^{*2}) & i(a^*b^* - ba) \\ ab^* + b^*a & i(a^*b - b^*a) & aa^* - bb^* \end{pmatrix}. \quad (3.91)$$

由于  $u \in SU(2)$  是连续的, 因此  $R_u$  被映射到  $O(3)$  中的一个连续片区, 而取  $a = 1, b = 0$  时,  $R_u$  为单位矩阵, 因此  $R_u$  属于包含单位元的连续片区, 即  $R_u \in SO(3)$ 。于是, 我们构建了  $SU(2)$  群到  $SO(3)$  群的映射关系。实际上这个映射还是同态映射。

■ **定理 3.3.**  $SO(3)$  的覆盖群是单连通的  $SU(2)$  群, 同态对应关系是  $1:2$ 。

证明. 先证明  $u \rightarrow R_u$  是一个  $SU(2)$  到  $SO(3)$  的同态映射。

1. 该映射保持乘法关系不变。  $\forall u, v \in SU(2)$ , 有

$$u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})u^{-1} = (R_u \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad v(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})v^{-1} = (R_v \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.92)$$

因此

$$vu(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma})(vu)^{-1} = v[(R_u \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}]v^{-1} = (R_v R_u \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma} = (R_{vu} \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}, \quad (3.93)$$

即满足

$$R_v R_u = R_{vu} \in SO(3), \quad (3.94)$$

保持乘法关系不变。

2. 该映射为满射, 即  $\forall R(\alpha, \beta, \gamma) \in SO(3)$ , 都能找到  $u \in SU(2)$ , 使得  $R_u = R(\alpha, \beta, \gamma)$ 。由于任意  $SO(3)$  群的元素都能用欧拉角表示为三个操作的乘积

$$\begin{aligned} R(\alpha, \beta, \gamma) &= Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3(\gamma) \\ &= \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (3.95)$$

因此只需找到三个操作各自对应的  $u$  即可。

(1)  $Q_3(\alpha)$ : 取  $a = e^{-i\alpha/2}$ ,  $b = 0$ , 即

$$u_1(\alpha) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix}, \quad (3.96)$$

对应的  $R_{u_1(\alpha)}$  为

$$R_{u_1(\alpha)} = \begin{pmatrix} \cos \alpha & -\sin \alpha & 0 \\ \sin \alpha & \cos \alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = Q_3(\alpha). \quad (3.97)$$

(2)  $Q_2(\beta)$ : 取  $a = \cos \frac{\beta}{2}$ ,  $b = -\sin \frac{\beta}{2}$ , 即

$$u_2(\beta) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix}, \quad (3.98)$$

对应的  $R_{u_2(\beta)}$  为

$$R_{u_2(\beta)} = \begin{pmatrix} \cos \beta & 0 & \sin \beta \\ 0 & 1 & 0 \\ -\sin \beta & 0 & \cos \beta \end{pmatrix} = Q_2(\beta). \quad (3.99)$$

(3)  $Q_3(\gamma)$ : 取  $a = e^{-i\gamma/2}$ ,  $b = 0$ , 即

$$u_1(\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}, \quad (3.100)$$

对应的  $R_{u_1(\gamma)}$  为

$$R_{u_1(\gamma)} = \begin{pmatrix} \cos \gamma & -\sin \gamma & 0 \\ \sin \gamma & \cos \gamma & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} = Q_3(\gamma). \quad (3.101)$$

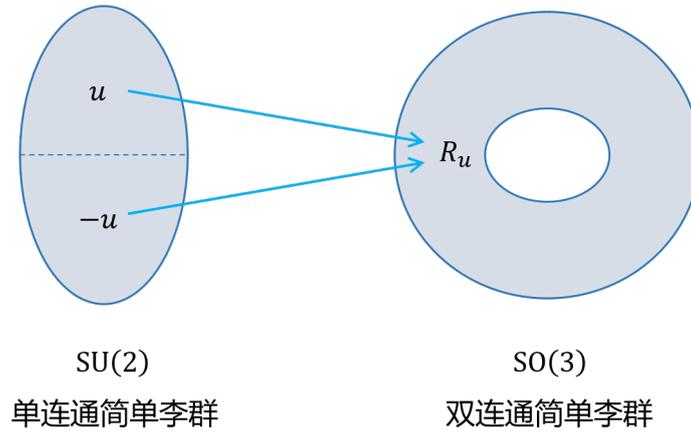


图 3.11:  $SU(2)$  是  $SO(3)$  的单连通覆盖, 存在  $2:1$  的同态关系。

因此, 对任意  $R(\alpha, \beta, \gamma) \in SO(3)$ , 都能找到  $SU(2)$  中的元素

$$\begin{aligned}
 u &= u_1(\alpha) u_2(\beta) u_1(\gamma) \\
 &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix},
 \end{aligned} \tag{3.102}$$

使得

$$u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}) u^{-1} = [R(\alpha, \beta, \gamma) \mathbf{r}] \cdot \boldsymbol{\sigma}, \tag{3.103}$$

因此为该映射为满射。

因此映射  $u \rightarrow R_u$  为  $SU(2)$  到  $SO(3)$  的群同态映射, 并且从  $u$  的形式也能看到  $\beta = 0$  时,  $\alpha + \gamma$  为相同值则给出相同的转动。

再证明同态关系是  $2:1$ 。考察  $R_u$  的表达式 (3.91) 式, 会发现当  $a \rightarrow -a, b \rightarrow -b$ , 即  $u \rightarrow -u$  时,  $R_u$  形式保持不变, 即  $u$  和  $-u$  会给出相同的  $R_u$ 。另外, 考虑同态映射的同态核, 即  $SO(3)$  中的单位元  $I_3$  对应的  $SU(2)$  中的元素, 我们发现当  $\alpha + \gamma = 2\pi k, \beta = 0, k$  为整数时,  $R_u = I_3$ , 因此同态核为

$$\left\{ \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \right\} \triangleleft SU(2). \tag{3.104}$$

由同态核定理也能给出  $u$  和  $-u$  映射为相同的  $R_u \in SO(3)$ , 因此  $SU(2) \sim SO(3)$  是  $2:1$  的同态关系, 如图 3.11 所示。因为  $SO(3)$  是双连通李群, 因此单连通的  $SU(2)$  是  $SO(3)$  的覆盖群, 这种单连通覆盖也被称为 universal cover。值得注意的是, 虽然整体上是  $2:1$  的同态关系, 但在单位元的邻域, 这个同态映射实际上是一个局域同构的映射。  $\square$

以上证明使用的是  $SO(3)$  群元素的欧拉角描述, 若采用  $R(\mathbf{n}, \phi)$  描述, 证明过程是类似的。  $\mathbf{n} = \mathbf{n}(\alpha, \beta)$ ,  $R(\mathbf{n}, \phi)$  由五个矩阵乘积描述, 即

$$R(\mathbf{n}, \phi) = Q_3(\alpha) Q_2(\beta) Q_3(\phi) Q_2^{-1}(\beta) Q_3^{-1}(\alpha), \tag{3.105}$$

其对应的  $SU(2)$  中的元素为

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \phi) &= u_1(\alpha) u_2(\beta) u_1(\phi) u_2^{-1}(\beta) u_1^{-1}(\alpha) \\
 &= \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\phi/2} & 0 \\ 0 & e^{i\phi/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ -\sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \\
 &= \begin{pmatrix} \cos \frac{\phi}{2} - i \sin \frac{\phi}{2} \cos \beta & -i \sin \frac{\phi}{2} \sin \beta e^{-i\alpha} \\ -i \sin \frac{\phi}{2} \sin \beta e^{i\alpha} & \cos \frac{\phi}{2} + i \sin \frac{\phi}{2} \cos \beta \end{pmatrix}, \tag{3.106}
 \end{aligned}$$

即  $a = \cos \frac{\phi}{2} - i \sin \frac{\phi}{2} \cos \beta$ ,  $b = -i \sin \frac{\phi}{2} \sin \beta e^{-i\alpha}$ , 因此也能证明映射为满射。除此之外,  $u(\mathbf{n}, \phi)$  作为  $SU(2)$  中的元素, 可以在单位元附近利用三个生成元  $\{\sigma_i\}$  表示, 即

$$\begin{aligned}
 u(\mathbf{n}, \phi) &= I_2 \cos \frac{\phi}{2} - i \sin \frac{\phi}{2} \begin{pmatrix} \cos \beta & \sin \beta e^{-i\alpha} \\ \sin \beta e^{i\alpha} & -\cos \beta \end{pmatrix} \\
 &= I_2 \cos \frac{\phi}{2} - i(\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \sin \frac{\phi}{2}, \tag{3.107}
 \end{aligned}$$

其中已使用  $\mathbf{n} = (\sin \beta \cos \alpha, \sin \beta \sin \alpha, \cos \beta)$ 。结合泡利矩阵的指数公式, 有

$$u(\mathbf{n}, \phi) = \exp \left[ -i \frac{\phi}{2} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right], \tag{3.108}$$

而  $SO(3)$  中的群元也能用生成元表示为  $R(\mathbf{n}, \phi) = \exp[-i\phi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{T})]$ , 可以看到, 在此描述下,  $SU(2)$  和  $SO(3)$  之间有更直观的映射关系:

$$u(\mathbf{n}, \phi) = \exp \left[ -i \frac{\phi}{2} (\mathbf{n} \cdot \boldsymbol{\sigma}) \right] \rightarrow R(\mathbf{n}, \phi) = \exp[-i\phi(\mathbf{n} \cdot \mathbf{T})], \tag{3.109}$$

即在  $SO(3)$  中旋转  $\phi$  角的操作对应于在  $SU(2)$  中“旋转”  $\phi/2$  的操作。二者存在如下对应关系

	$SO(3)$	$SU(2)$
群元	$R(\mathbf{n}, \phi)$	$u(\mathbf{n}, \phi)$
周期	$2\pi$ $R(\mathbf{n}, \phi + 2\pi) = R(\mathbf{n}, \phi)$	$4\pi$ $u(\mathbf{n}, \phi + 4\pi) = u(\mathbf{n}, \phi)$
半周期	$R(\mathbf{n}, \pi) = R(-\mathbf{n}, \pi)$	$u(\mathbf{n}, 2\pi) = -1 (I_2)$
参数范围	$\alpha \in [0, \pi]$ $\beta \in [0, 2\pi]$ $\phi \in [0, \pi]$ $R(\mathbf{n}, \phi) = R(-\mathbf{n}, 2\pi - \phi)$	$\alpha \in [0, \pi]$ $\beta \in [0, 2\pi]$ $\phi \in [0, 2\pi]$ $u(\mathbf{n}, \phi) = u(-\mathbf{n}, 4\pi - \phi) = -u(-\mathbf{n}, 2\pi - \phi)$

$SU(2)$  群以转动  $4\pi$  为周期,  $SU(2)$  群是物理上自旋  $1/2$  粒子存在的数学基础, 自旋  $1/2$  粒子转动  $4\pi$  角才恢复原状。由此可见,  $SU(2)$  的参数空间为半径为  $2\pi$  的三维球体, 方向矢量  $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{n}$ , 模  $r = \phi$ , 且该球的表面取值  $u(\mathbf{n}, 2\pi) = -1$ , 如图3.12所示。

实际上, 由于球面是等值的,  $SU(2)$  的参数空间是一个四维球体的表面, 即三维球面  $S^3$ , 因为群元  $u$  可用两个复参量  $a, b \in \mathbb{C}$  表示, 行列式为 1 要求  $|a|^2 + |b|^2 = 1$ 。记  $a, b$  的实部为  $a_1, b_1$ , 虚部为  $a_2, b_2$ , 其中  $a_{1,2}, b_{1,2} \in \mathbb{R}$ , 参数空间为

$$\{(a_1, a_2, b_1, b_2) \in \mathbb{R}^4 | a_1^2 + a_2^2 + b_1^2 + b_2^2 = 1\},$$

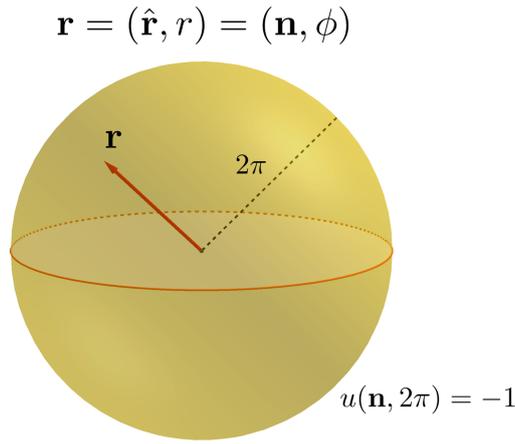


图 3.12:  $SU(2)$  群的参数空间。

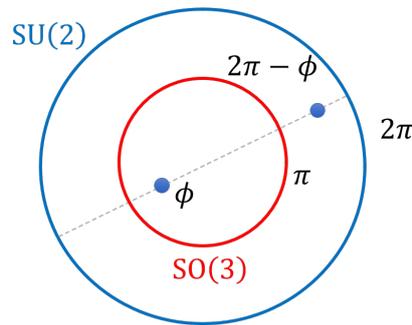


图 3.13:  $SU(2)$  群和  $SO(3)$  群的对应关系。

因此是一个三维球面  $S^3$ 。

已知  $SU(2)$  同态于  $SO(3)$ ，同态关系如图3.11所示，且同态核为  $\{I_2, -I_2\} < SU(2)$ ，该同态核对应于  $u(\mathbf{n}, 2\pi k)$ ， $k$  为整数，当  $k$  取偶数时为单位元  $I_2$ ， $k$  取奇数时为  $-I_2$ ，因此同态核同构于整数模 2 群  $\{I_2, -I_2\} \cong \mathbb{Z}_2$ 。由同态核定理知， $\mathbb{Z}_2$  为  $SU(2)$  的不变子群，对应的商群同构于  $SO(3)$ ，即

$$SU(2) / \mathbb{Z}_2 \cong SO(3). \tag{3.110}$$

该同态关系也可反映在二者的群空间上，如图3.13所示。在  $SU(2)$  中， $0 < \phi < \pi$  的元素由  $u(\mathbf{n}, \phi) \rightarrow R(\mathbf{n}, \phi)$  直接映射到  $SO(3)$  中，同时

$$u(\mathbf{n}, \phi) = u(-\mathbf{n}, 4\pi - \phi) = -u(-\mathbf{n}, 2\pi - \phi),$$

表明元素  $u(-\mathbf{n}, 2\pi - \phi)$  也被映射为  $R(\mathbf{n}, \phi)$ ，此时  $\pi < 2\pi - \phi < 2\pi$ 。因此该同态关系把  $0 < \phi < \pi$  的部分和  $\pi < \phi' < 2\pi$  的部分都映射到  $SO(3)$  上，同样表现出是 2:1 的覆盖关系。

用类似的方法可以研究  $n$  阶酉群  $U(n)$  和特殊酉群  $SU(n)$ 。 $U(n)$  是连续的、连通的、紧致的  $n^2$  维李群，而  $SU(n)$  是连续的、连通的、紧致的  $n^2 - 1$  维李群。二者的维数可从生成元的数目判断。 $n$  阶酉群  $U(n)$  是连通的，因此所有群元都可通过单位元邻域的无穷小变换生成，考虑其无穷小变换为  $U(\epsilon) = I_n - i\epsilon A$ ，则酉矩阵的要求给出

$$\begin{aligned} U^\dagger U &= (I_n + i\epsilon A^\dagger)(I_n - i\epsilon A) \\ &= I_n + i\epsilon(A^\dagger - A) + O(\epsilon^2) \\ &= I_n, \end{aligned} \tag{3.111}$$

因此需要  $A^\dagger = A$  为  $n$  阶厄密矩阵, 任意群元可用无限小变换连续作用得到, 即

$$\begin{aligned} U(\theta) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ U\left(\frac{\theta}{N}\right) \right]^N \\ &= \lim_{N \rightarrow \infty} \left[ I_n - i\frac{\theta}{N}A \right]^N \\ &= \exp(-i\theta A), \end{aligned} \quad (3.112)$$

即  $n$  阶酉矩阵总能表示成厄密矩阵  $\theta A$  乘以  $-i$  的指数函数 ( $\theta \in \mathbb{R}$ )。而一个  $n$  阶厄密矩阵  $\theta A$  的对角元给出  $n$  个实参数, 非对角元给出  $n(n-1)$  个实参数, 因此  $U(n)$  群的生成元为  $n^2$  个线性无关的厄密矩阵  $\{h_i\}$ , 以  $n^2$  个生成元可展开厄密矩阵  $\theta A = \sum_{j=1}^{n^2} a_j h_j$ , 故  $U(n)$  群任意群元都可表示为

$$U(a_1, a_2, \dots, a_{n^2}) = \exp\left(-i \sum_{j=1}^{n^2} a_j h_j\right), \quad (3.113)$$

即使用  $n^2$  个实参数  $\{a_1, a_2, \dots, a_{n^2}\}$  刻画。 $SU(n)$  群在此基础上需要满足行列式为 1 的要求, 即

$$\det U(\theta) = \det [\exp(-i\theta A)] = \exp(-i\theta \text{tr} A) = 1, \quad (3.114)$$

因而需要  $A$  为零迹厄密矩阵 (矩阵指数公式可用雅可比公式证明), 零迹的条件使厄密矩阵的对角元给出  $n-1$  个实参数, 因此  $SU(n)$  群的生成元为  $n^2-1$  个线性无关的厄密矩阵  $\{h_i\}$ , 由  $n^2-1$  个实参数  $\{a_1, a_2, \dots, a_{n^2-1}\}$  描述其群元。

最后求  $SU(2)$  的不可约表示。因为  $SU(2) \sim SO(3)$ , 即  $SO(3)$  的所有表示都是  $SU(2)$  的表示, 而  $SO(3)$  的不等价不可约表示由球谐函数张成的表示空间给出, 因此我们需要找出  $SU(2)$  的表示中不是  $SO(3)$  表示的部分即可。

取  $\mathcal{L}^j$  为表示空间,  $j$  为标记不等价不可约表示的指标,  $\mathcal{L}^j$  为函数空间, 其基为函数  $\psi_m^j(\mathbf{x})$ ,  $m$  标记不同的基函数,  $\mathbf{x} = \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}$  为  $SU(2)$  群对应的线性空间中的 2 维向量。将  $u \in SU(2)$  作用于  $\mathbf{x}$  上, 有

$$\begin{pmatrix} x'_1 \\ x'_2 \end{pmatrix} = u \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} a & b \\ -b^* & a^* \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix}. \quad (3.115)$$

取基函数的形式为

$$\psi_m^j(\mathbf{x}) = \psi_m^j(x_1, x_2) = \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} x_1^{j-m} x_2^{j+m}, \quad m = -j, -j+1, \dots, j. \quad (3.116)$$

将  $u$  对应的函数变换算符  $P_u$  作用至基函数上, 为

$$P_u \psi_m^j(\mathbf{x}) = \psi_m^j(u^{-1}\mathbf{x}) = \sum_{m'} A_{m'm}^j(u) \psi_{m'}^j(\mathbf{x}), \quad (3.117)$$

$A^j(u)$  即为  $P_u$  的表示矩阵,  $u$  可用欧拉角描述:

$$u = u_1(\alpha) u_2(\beta) u_1(\gamma) = \begin{pmatrix} e^{-i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & -\sin \frac{\beta}{2} \\ \sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} e^{-i\gamma/2} & 0 \\ 0 & e^{i\gamma/2} \end{pmatrix}. \quad (3.118)$$

分别求三个转动的表示矩阵即可。

记  $u_1(\alpha) = (\mathbf{e}_3, \alpha)$ , 则

$$(\mathbf{e}_3, \alpha)^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} & 0 \\ 0 & e^{-i\alpha/2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{i\alpha/2} x_1 \\ e^{-i\alpha/2} x_2 \end{pmatrix}, \quad (3.119)$$

相应的函数变换算符作用在基函数为

$$\begin{aligned} P_{(\mathbf{e}_3, \alpha)} \psi_m^j(\mathbf{x}) &= \psi_m^j(e^{i\alpha/2} x_1, e^{-i\alpha/2} x_2) \\ &= \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} (e^{i\alpha/2} x_1)^{j-m} (e^{-i\alpha/2} x_2)^{j+m} \\ &= \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} x_1^{j-m} x_2^{j+m} e^{-im\alpha} \\ &= e^{-im\alpha} \psi_m^j(\mathbf{x}), \end{aligned} \quad (3.120)$$

因此  $A_{m'm}^j((\mathbf{e}_3, \alpha))$  是对角的

$$A_{m'm}^j((\mathbf{e}_3, \alpha)) = e^{-im\alpha} \delta_{mm'}. \quad (3.121)$$

同理,  $u_1(\gamma) = (\mathbf{e}_3, \gamma)$  对应的函数变换算符  $P_{(\mathbf{e}_3, \gamma)}$ , 在基函数  $\psi_m^j(\mathbf{x})$  下的表示矩阵也是对角的, 即

$$A_{m'm}^j((\mathbf{e}_3, \gamma)) = e^{-im\gamma} \delta_{mm'}. \quad (3.122)$$

对于  $u_2(\beta) = (\mathbf{e}_2, \beta)$ , 则有

$$(\mathbf{e}_2, \beta)^{-1} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} & \sin \frac{\beta}{2} \\ -\sin \frac{\beta}{2} & \cos \frac{\beta}{2} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x_1 \\ x_2 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} x_1 + \sin \frac{\beta}{2} x_2 \\ -\sin \frac{\beta}{2} x_1 + \cos \frac{\beta}{2} x_2 \end{pmatrix}, \quad (3.123)$$

因此有

$$\begin{aligned} P_{(\mathbf{e}_2, \beta)} \psi_m^j(\mathbf{x}) &= \psi_m^j\left(\cos \frac{\beta}{2} x_1 + \sin \frac{\beta}{2} x_2, -\sin \frac{\beta}{2} x_1 + \cos \frac{\beta}{2} x_2\right) \\ &= \frac{(-1)^{j-m}}{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}} \left(\cos \frac{\beta}{2} x_1 + \sin \frac{\beta}{2} x_2\right)^{j-m} \left(-\sin \frac{\beta}{2} x_1 + \cos \frac{\beta}{2} x_2\right)^{j+m}. \end{aligned} \quad (3.124)$$

利用二项式定理展开

$$\begin{aligned} \left(\cos \frac{\beta}{2} x_1 + \sin \frac{\beta}{2} x_2\right)^{j-m} &= \sum_{r_1=0}^{j-m} \frac{(j-m)!}{r_1!(j-m-r_1)!} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{j-m-r_1} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{r_1} x_1^{j-m-r_1} x_2^{r_1}, \\ \left(-\sin \frac{\beta}{2} x_1 + \cos \frac{\beta}{2} x_2\right)^{j+m} &= \sum_{r_2=0}^{j+m} \frac{(j+m)!}{r_2!(j+m-r_2)!} (-1)^{j+m-r_2} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{j+m-r_2} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{r_2} x_1^{j+m-r_2} x_2^{r_2}, \end{aligned}$$

代入  $P_{(\mathbf{e}_2, \beta)} \psi_m^j(\mathbf{x})$

$$\begin{aligned} P_{(\mathbf{e}_2, \beta)} \psi_m^j(\mathbf{x}) &= (-1)^{j-m} \sum_{r_1=0}^{j-m} \sum_{r_2=0}^{j+m} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}{r_1! r_2! (j-m-r_1)! (j+m-r_2)!} \\ &\quad \times (-1)^{j+m-r_2} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{j-m-r_1+r_2} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{j+m+r_1-r_2} x_1^{2j-r_1-r_2} x_2^{r_1+r_2}. \end{aligned}$$

令  $r_1 + r_2 = j + m'$ ,  $2j - r_1 - r_2 = j - m'$ , 当  $r_1 = r_2 = 0$  时,  $m'$  取最小值  $-j$ ; 当  $r_1 = j - m, r_2 = j + m$  时,  $m'$  取最大值  $j$ 。将求和指标从  $(r_1, r_2)$  变为  $(m', r_1)$ , 则  $r_2 = j + m' - r_1$ , 因此

$$\begin{aligned}
P_{(\mathbf{e}_2, \beta)} \psi_m^j(\mathbf{x}) &= \sum_{m'=j}^{-j} \sum_{r_1=0}^{j-m} \frac{\sqrt{(j+m)!(j-m)!}}{r_1!(j+m'-r_1)!(j-m-r_1)!(m-m'+r_1)!} \\
&\quad \times (-1)^{j-m'+r_1} \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-m+m'-2r_1} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m-m'+2r_1} x_1^{j-m'} x_2^{j+m'} \\
&= \sum_{m'=j}^{-j} \sum_{r_1=0}^{j-m} (-1)^{r_1} \frac{\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}}{r_1!(j+m'-r_1)!(j-m-r_1)!(m-m'+r_1)!} \\
&\quad \times \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-m+m'-2r_1} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m-m'+2r_1} \psi_{m'}^j(\mathbf{x}) \\
&= \sum_{m'=-j}^j A_{m'm}^j((\mathbf{e}_2, \beta)) \psi_{m'}^j(\mathbf{x}),
\end{aligned} \tag{3.125}$$

其中

$$\begin{aligned}
A_{m'm}^j((\mathbf{e}_2, \beta)) &= \sum_{r=0}^{j-m} (-1)^r \frac{\sqrt{(j+m')!(j-m')!(j+m)!(j-m)!}}{r!(j+m'-r)!(j-m-r)!(m-m'+r)!} \\
&\quad \times \left(\cos \frac{\beta}{2}\right)^{2j-m+m'-2r} \left(\sin \frac{\beta}{2}\right)^{m-m'+2r},
\end{aligned} \tag{3.126}$$

对求和指标的要求是使得所有分母的阶乘非负, 即

$$r \geq 0, \quad r \leq j - m, \quad r \leq j + m', \quad r \geq m' - m. \tag{3.127}$$

因此, 任意  $u = (\mathbf{e}_3, \alpha)(\mathbf{e}_2, \beta)(\mathbf{e}_3, \gamma)$  的表示矩阵为

$$\begin{aligned}
A_{m'm}^j(\alpha, \beta, \gamma) &= [A^j((\mathbf{e}_3, \alpha)) A^j((\mathbf{e}_2, \beta)) A^j((\mathbf{e}_3, \gamma))]_{m'm} \\
&= e^{-im'\alpha} A_{m'm}^j((\mathbf{e}_2, \beta)) e^{-im'\gamma}.
\end{aligned} \tag{3.128}$$

当  $j$  取便所有非负整数及半奇数时,  $A^j$  给出  $SU(2)$  的所有表示。

现在我们考虑不同的不可约表示  $A^j$  下  $SU(2)$  的不变子群  $\{I_2, -I_2\}$  的表示矩阵。因为

$$u(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix},$$

虽然可以有多个参数  $(\alpha, \beta, \gamma)$  使得  $u$  为  $I_2$  和  $-I_2$ , 但  $I_2$  和  $-I_2$  作为李群元素是唯一的, 我们只需找出其中两组特定参数使得  $u$  分别为  $I_2$  和  $-I_2$  即可。当  $\alpha = \beta = \gamma = 0$  时,  $u(0, 0, 0) = I_2$ , 而当  $\alpha = \beta = 0, \gamma = 2\pi$  时,  $u(0, 0, 2\pi) = -I_2$ 。此时两个表示矩阵为

$$A_{m'm}^j(0, 0, 0) = A_{m'm}^j((\mathbf{e}_2, 0)), \quad A_{m'm}^j(0, 0, 2\pi) = A_{m'm}^j((\mathbf{e}_2, 0)) e^{-i2\pi m}. \tag{3.129}$$

因为  $m = -j, -j+1, \dots, j$ , 当  $j$  为整数时, 所有  $m$  都为整数,  $e^{-i2\pi m} = 1$ , 即  $A_{m'm}^j(0, 0, 0) = A_{m'm}^j(0, 0, 2\pi)$ ; 当  $j$  为半奇数时, 所有  $m$  都是半奇数, 所以  $e^{-i2\pi m} = -1$ , 即  $A_{m'm}^j(0, 0, 0) = -A_{m'm}^j(0, 0, 2\pi)$ 。因此, 不可约表示  $A^j$  下  $\{I_2, -I_2\}$  的表示矩阵满足

$$A^j(-I_2) = (-1)^{2j} A^j(I_2). \tag{3.130}$$

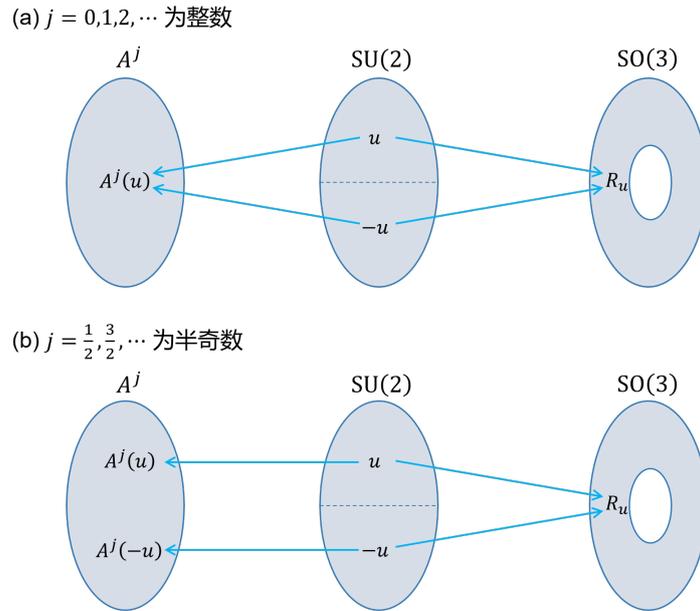


图 3.14:  $SO(3)$  与  $SU(2)$  及其不可约表示的关系图。(a)  $j$  为非负整数时的关系。(b)  $j$  为半奇数时的关系。

由同态核定理知  $\{I_2, -I_2\}$  为  $SU(2)$  的不变子群, 当  $SU(2)$  以  $\{I_2, -I_2\}$  做陪集分割时, 每个陪集为  $\{u, -u\}$ , 于是所有群元的表示矩阵都满足

$$A^j(-u) = A^j(-I_2) A^j(u) = (-1)^{2j} A^j(I_2) A^j(u) = (-1)^{2j} A^j(u). \tag{3.131}$$

因此可以总结为

1. 当  $j$  取整数时,  $A^j(-u) = A^j(u)$  同时给出  $SU(2)$  和  $SO(3)$  的表示, 是  $SO(3)$  的单值表示 (忠实表示)。对于  $SU(2)$  而言, 此时的同态关系是  $2:1$  映射, 因此  $A^j$  是  $SU(2)$  的非忠实表示。关系图如图3.14(a) 所示。
2. 当  $j$  取半奇数时,  $A^j(-u) = -A^j(u)$  给出  $SU(2)$  的表示, 但原则上不是  $SO(3)$  的表示, 因为该映射不保持  $SO(3)$  的乘法关系。但是如果把保持乘法关系的要求放宽至相差一个符号, 即  $A^j(g_1) A^j(g_2) = \pm A^j(g_1 g_2)$ , 则称  $A^j$  为  $SO(3)$  的双值表示, 是一种投影表示。对于  $SU(2)$  而言, 此时的同态关系是一一映射, 因此  $A^j$  是  $SU(2)$  的忠实表示。关系图如图3.14(b) 所示。

最后再求不可约表示  $A^j$  的特征标。一般而言, 用欧拉角描述较难计算特征标, 因此可以采用绕轴  $\mathbf{n}$  转动的描述, 此时的  $SU(2)$  群元为

$$u(\mathbf{n}, \phi) = u_1(\alpha) u_2(\beta) u_1(\phi) u_2^{-1}(\beta) u_1^{-1}(\alpha) = S u(\hat{z}, \phi) S^{-1}, \tag{3.132}$$

表明  $u(\hat{z}, \phi)$  与  $u(\mathbf{n}, \phi)$  是同类元素, 而  $u(\hat{z}, \phi)$  的表示矩阵即为  $A^j((\mathbf{e}_3, \phi))$ , 因此特征标只是定轴转角  $\phi$  的函数, 为

$$\begin{aligned} \chi^j(\phi) &= \sum_{m=j}^j A_{mm}^j((\mathbf{e}_3, \phi)) \\ &= \sum_{m=j}^j e^{-im\phi} \\ &= \frac{\sin[(j+1/2)\phi]}{\sin(\phi/2)}, \end{aligned} \tag{3.133}$$

形式上与  $SO(3)$  不可约表示的特征标相同, 区别在于  $j$  可取任意非负整数和半奇数  $j = 0, 1/2, 1, \dots$ 。

1.  $j = 0$ ,  $A^0$  为 1 维恒等表示,  $A^0(u) = 1$ 。
2.  $j = 1/2$ ,  $A^{1/2}$  为 2 维表示,  $m = -1/2, 1/2$ , 取基函数为  $\{\psi_{1/2}^{1/2}(\mathbf{r}), \psi_{-1/2}^{1/2}(\mathbf{r})\}$ , 可以求出

$$A^j(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix} = u(\alpha, \beta, \gamma),$$

是  $SU(2)$  的自身表示。

3.  $j = 1$ ,  $A^1$  为 3 维表示,  $m = -1, 0, 1$ , 为  $SO(3)$  的自身表示。

## 4 点群与空间群

### 4.1 点群基础

描述三维欧氏空间的纯转动对称性的群是  $SO(3)$ ，其定义如下。

§ **定义 3.3.**  $SO(3)$  群  $O(3)$  群的所有行列式为 1 的正交变换形成的不变子群称为三维转动群，记为  $SO(3)$  (*special orthogonal group*)。

$SO(3)$  里的元素描述的是转动操作，因其能定义转轴，且不改变手性。

■ **定理 3.2.** 对  $\forall g \in SO(3)$ ，可在  $\mathbb{R}^3$  中找到一个向量  $\mathbf{k}$ ，使得  $g\mathbf{k} = \mathbf{k}$ 。

以上定理保证  $SO(3)$  中转角相同的元素为同类元素。对于不约束行列式为 1 的  $O(3)$  群，也存在类似的定理。

■ **定理 4.1.**  $O(3)$  群中，所有具有相同转角的转动元素是一类，所有具有相同转角的转动反演元素是一类。

证明.  $SO(3)$  为  $O(3)$  的不变子群，有陪集分割  $O(3) = SO(3) \cup ISO(3)$ ，其中  $I$  为空间反演操作，或  $-1$  倍单位矩阵  $-I_3$ 。两个陪集代表元可取为  $\{C_{\mathbf{k}}(\varphi), IC_{\mathbf{k}}(\varphi)\}$ ，其中  $C_{\mathbf{k}}(\varphi)\mathbf{k} = \mathbf{k}$  为保持转轴  $\mathbf{k}$  不变的转动操作。

**定理 3.2** 的证明已表明  $\forall g \in SO(3)$ ，有

$$gC_{\mathbf{k}}(\varphi)g^{-1} = C_{g\mathbf{k}}(\varphi) \sim C_{\mathbf{k}}(\varphi), \quad (4.1)$$

因此， $\forall Ig \in ISO(3)$ ，同样有

$$\begin{aligned} (Ig)C_{\mathbf{k}}(\varphi)(Ig)^{-1} &= (Ig)C_{\mathbf{k}}(\varphi)(g^{-1}I^{-1}) \\ &= II^{-1}gC_{\mathbf{k}}(\varphi)g^{-1} \\ &= gC_{\mathbf{k}}(\varphi)g^{-1} \\ &\sim C_{\mathbf{k}}(\varphi), \end{aligned} \quad (4.2)$$

其中已利用  $I$  与任意  $C_{\mathbf{k}}(\varphi)$  对易的性质。因此  $O(3)$  中所有具有相同转角的转动元素是一类。

转动反演元素可表示为  $IC_{\mathbf{k}}(\varphi)$ ，对以上两个公式左乘  $I$  得  $\forall g \in SO(3), Ig \in ISO(3)$ ，有

$$g[IC_{\mathbf{k}}(\varphi)]g^{-1} = IC_{g\mathbf{k}}(\varphi) \sim IC_{\mathbf{k}}(\varphi), \quad (4.3)$$

$$(Ig)[IC_{\mathbf{k}}(\varphi)](Ig)^{-1} = g[IC_{\mathbf{k}}(\varphi)]g^{-1} \sim IC_{\mathbf{k}}(\varphi),$$

因此  $O(3)$  中所有具有相同转角的转动反演元素是一类。□

**注.** 此结论对于  $O(3)$  的有限子群不成立，因为有限子群不一定包含联系两个相同角度转动元素或转动反演元素的元素。

$O(3)$  群是描述保持三维单位球不变的旋转对称群, 具有相当高的对称性, 且是无限群。而实际的晶体、分子、准晶体系, 通常只有  $O(3)$  中的部分对称性, 因此其对称群是  $O(3)$  的有限子群。因为  $O(3)$  的有限子群的操作至少保持一个点不动 (三维单位球球心), 因此也称为点群。

**§ 定义 4.1. 点群** 三维实正交群  $O(3)$  的有限子群称为点群, 只含转动元素的点群称为第一类点群, 第一类点群也是  $SO(3)$  群的子群。含转动且含转动反演的点群称为第二类点群。

三维实正交群  $O(3)$  的元素  $\{C_{\mathbf{k}}(\varphi), IC_{\mathbf{k}'}(\varphi')\}$  的转角  $\varphi \in [0, 2\pi] / 0 \sim 2\pi$ , 是一个连续取值的参数。而点群是有限群, 其转角  $\varphi$  不能取连续值, 而有以下要求。

**■ 定理 4.2.** 设群  $G$  是绕固定轴  $\mathbf{k}$  转动生成的  $n$  阶群, 则  $G$  由元素  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$  生成。

证明. 群  $G$  是绕固定轴  $\mathbf{k}$  转动生成的  $n$  阶群, 因此只有  $n$  个元素, 且都是绕  $\mathbf{k}$  轴的转动, 因此记为  $C_{\mathbf{k}}(\theta_i)$ ,  $i = 0, 1, \dots, n-1$ 。选  $\theta_0 = 0$  对应单位元素,  $\theta_1$  是非零转动中的最小转角, 其他  $\theta_i$  可以写成  $\theta_i = m_i\theta_1 + \phi_i$  的形式, 其中  $0 \leq \phi_i < \theta_1$ ,  $m_i$  为正整数。因此, 存在关系

$$C_{\mathbf{k}}(\theta_i) = C_{\mathbf{k}}^{m_i}(\theta_1) C_{\mathbf{k}}(\phi_i), C_{\mathbf{k}}^{-m_i}(\theta_1) C_{\mathbf{k}}(\theta_i) = C_{\mathbf{k}}(\phi_i) \in G. \quad (4.4)$$

因为  $\theta_1$  为最小的非零转角, 所以封闭性要求  $\phi_i = 0$ , 即  $\theta_i = m_i\theta_1$ ,  $G$  中任意元素都能由  $C_{\mathbf{k}}(\theta_1)$  生成, 并且  $C_{\mathbf{k}}^n(\theta_1) = C_{\mathbf{k}}(\theta_0)$ , 因此  $C_{\mathbf{k}}(\theta_1)$  为  $n$  次转动, 即  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$ 。  $G$  由  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$  生成。  $\square$

因此, 点群元素只能取  $\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n), IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$ , 即转角只能为  $2\pi/n$ ,  $n$  为正整数。同时, 元素  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$  的存在, 表明转轴  $\mathbf{k}$  是一个  $n$  次转动轴。除了转动轴外, 还存在其他对称操作作用的实体, 统称为对称元素。

**§ 定义 4.2. 对称元素** 对称元素是系统中对称操作所作用的几何实体, 如点, 线, 面。点群的对称元素包括: (1) 反演中心; (2) 转动轴; (3) 反射面; (4) 转动反演轴; (5) 转动反射面。

这些对称元素承担着特定的对称操作:

1. 反演中心, 承担空间反演操作  $I$ ,

$$I: (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, -z). \quad (4.5)$$

2. 转动轴, 承担绕轴旋转操作  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$ , 如

$$C_z(\pi): (x, y, z) \rightarrow (-x, -y, z). \quad (4.6)$$

3. 反射面, 承担反射操作  $\sigma_{\mathbf{k}}$ , 其中  $\mathbf{k}$  为反射面的法线方向, 如

$$\sigma_z: (x, y, z) \rightarrow (x, y, -z). \quad (4.7)$$

4. 转动反演轴, 承担转动反演操作  $IC_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$ , 如

$$IC_z\left(\frac{\pi}{2}\right): (x, y, z) \rightarrow (y, -x, -z). \quad (4.8)$$

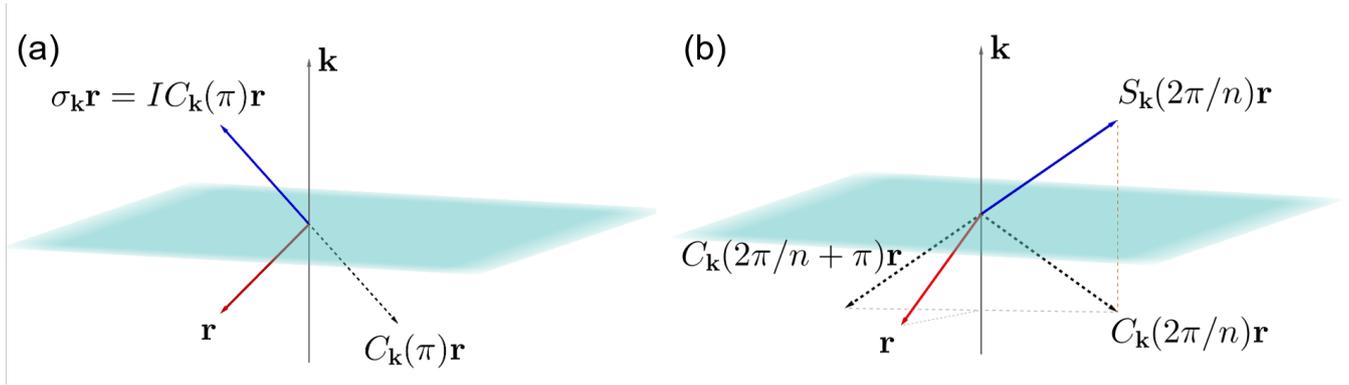


图 4.1: (a) 反射操作及 (b) 转动反射操作与转动反演操作的联系。

5. 转动反射面, 承担转动反射操作  $S_{\mathbf{k}}(2\pi/n) = \sigma_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$ , 如

$$S_z\left(\frac{\pi}{2}\right) : (x, y, z) \rightarrow (-y, x, -z). \quad (4.9)$$

反射操作  $\sigma_{\mathbf{k}}$  和转动反射操作  $S_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$  也能写成转动反演的形式, 为

$$\sigma_{\mathbf{k}} = IC_{\mathbf{k}}(\pi), S_{\mathbf{k}}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = \sigma_{\mathbf{k}}C_{\mathbf{k}}\left(\frac{2\pi}{n}\right) = IC_{\mathbf{k}}\left(\frac{2\pi}{n} + \pi\right). \quad (4.10)$$

操作间的关系如图4.1所示。

由元素  $\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n), IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$  构成的点群, 蕴含很强的结构特征, 反映为以下定理。

**定理 4.3.** 设  $G$  是点群,  $K$  是  $G$  的纯转动部分 (由于纯转动部分的乘积以及逆元必属于这个纯转动部分, 所以  $K$  也是  $G$  的纯转动子群), 即  $K = G \cap \text{SO}(3)$ , 则  $G$  与  $K$  的关系只能有下面三种情况:

1.  $G = K$ , 此时  $G$  是  $\text{SO}(3)$  的有限子群, 又称为第一类点群, 它只包含纯转动操作;
2.  $G = K \cup IK$ , 此时  $G$  包含纯反演操作  $I$ , 又称为第二类点群;
3.  $G \neq K$  且  $I \notin G$ ,  $G$  必与一个纯转动群  $G^+$  同构, 这里  $G^+ = K \cup K^+$ ,  $K^+ = \{Ig | g \in G, \text{但 } g \notin K\}$ ,  $G$  也是第二类点群。

证明. 第一种情况  $G = K$  是显然的, 因此只需证明后两种情况即可.  $G$  不是纯转动元素集合时, 为  $G = \{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)\}, \{IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\} = \{K, IK^+\}$ , 即  $G = K \cup IK^+$ 。

若  $I \in G$ , 由重排定理有  $IG = G = \{IK, K^+\}$ , 与  $G = \{K, IK^+\}$  相同, 要求  $K = K^+$ , 因此  $G = K \cup IK$ , 为第二种情况。

若  $G$  不包含反演元素  $I$ , 构造集合  $G^+ = K \cup K^+$ ,  $G^+$  与  $G$  存在一一对应关系。利用  $G = K \cup IK^+$  构成群可以证明  $G^+$  构成群, 其中满足结合律和单位元是显然。

(1) 封闭性: 在  $G$  中, 任意两个  $\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)\}$  中元素的乘积属于  $K$ , 任意两个  $\{IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$  中元素的乘积属于  $K$ , 一个  $\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)\}$  中元素与一个  $\{IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$  中元素的乘积属于  $IK^+$ , 即在  $G$  中存在一个简化版的乘法表, 为

$G$	$\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)\}$	$\{IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$
$\{C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)\}$	$K$	$IK^+$
$\{IC_{\mathbf{k}'}(2\pi/n')\}$	$IK^+$	$K$

实际上,  $K$  还是  $G = K \cup IK^+$  的不变子群, 因为  $K$  是  $G$  指数为 2 的子群。对于  $G^+ = K \cup K^+$ , 任意两个  $\{C_k(2\pi/n)\}$  中元素的乘积属于  $K$ , 任意两个  $K^+ = \{C_{k'}(2\pi/n')\}$  中元素的乘积属于  $K$ , 因为反演操作与转动操作可对易, 而一个  $\{C_k(2\pi/n)\}$  中元素与一个  $\{C_{k'}(2\pi/n')\}$  中元素的乘积属于  $K^+$ , 因此  $G$  中亦有一个乘法表

$G^+$	$\{C_k(2\pi/n)\}$	$\{C_{k'}(2\pi/n')\}$
$\{C_k(2\pi/n)\}$	$K$	$K^+$
$\{C_{k'}(2\pi/n')\}$	$K^+$	$K$

满足封闭性。

(2) 逆元素:  $K$  中任意元素的逆元素也在  $K$  中, 因此只需判断  $K^+$  中任意元素的逆元素也在  $K^+$  中即可。因为  $G$  构成群,  $IK^+$  中任意元素的逆元素也在  $IK^+$  中, 因此  $K^+$  中任意元素的逆元素也在  $K^+$  中。于是  $G^+ = K \cup K^+$  包含其任意元素的逆元素。

于是  $G^+ = K \cup K^+$  也构成群, 且与  $G$  同构, 并且已找到  $G^+ = \{\{C_k(2\pi/n)\}, \{C_{k'}(2\pi/n')\}\}$  只包含转动元素, 是第一类点群。□

该定理不仅指出了点群的结构关系, 还给出了通过第一类点群构造第二类点群的方法。若已有第一类点群  $G$ , 则可通过以下两种方式构造第二类点群: (1) 构造  $G \cup IG$ , 即  $G \otimes \{E, I\}$ ; (2) 若  $G$  存在指数为 2 的不变子群  $K$ , 构造  $K \cup I(G - K)$ 。因此, 需要先找出所有的第一类点群。

## 4.2 第一类点群

在给出第一类点群的分类之前, 先回顾第一章变换群的部分内容。

§ 定义 1.23. 等价性 设  $G$  为  $X$  上的变换群, 若对  $x, y \in X$ , 存在  $g \in G$ , 使得  $g(x) = y$ , 则称  $x$  与  $y$  等价, 记为  $x \sim y$ 。

§ 定义 1.24.  $x$  的  $G$  轨道 设  $G$  为  $X$  上的变换群,  $x$  为  $X$  中元素, 由  $X$  中所有与  $x$  等价的元素的集合, 称为  $x$  的  $G$  轨道。

§ 定义 1.26. 迷向子群 设  $G$  是  $X$  上的变换群,  $x$  是  $X$  中一点,  $G$  的子群  $G^x$  保持  $x$  不变, 也就是  $G^x = \{h | h \in G \text{ 且 } hx = x\}$ , 则称  $G^x$  是  $G$  对  $x$  的迷向子群。

■ 定理 1.8. 设  $G^x$  是  $G$  对  $x$  的迷向子群, 则  $G^x$  的每个左陪集把  $x$  映为  $G$  中一个特定的点  $y$ , 且不同陪集把它映为不同的点。也就是说含  $x$  的  $G$  轨道上的点, 与  $G^x$  的左陪集一一对应。

■ 定理 1.9. 当群  $G$  的阶为  $n$ , 其迷向子群  $G^x$  的阶为  $m$  时, 含  $x$  的  $G$  轨道点的个数为  $n/m$ 。

假设一个第一类点群  $G$ , 含有转轴  $C_{n_1}, C_{n_2}, \dots, C_{n_i}, \dots$ ,  $n_i$  为大于等于 2 的整数, 每个  $C_{n_i}$  代表不同的转轴,  $n_i$  为阶数, 因此  $C_{n_i}$  将给出  $(n_i - 1)$  个非恒等元素。第一类点群的分类思路是对比群阶  $n$  与所有转动操作给出的元素个数。为此我们引入极点的概念。

§ 定义 4.3. 极点 设  $G$  为第一类点群,  $S_r$  为以原点为球心以  $r$  为半径的球面。对于球面上一点  $\mathbf{r}$ , 若  $g \in G (g \neq e)$ , 有  $g\mathbf{r} = \mathbf{r}$ , 则  $\mathbf{r}$  称为群  $G$  在  $S_r$  上的一个极点。

$G$  中保持极点  $\mathbf{r}$  不变的元素  $g$ , 构成  $G$  对  $\mathbf{r}$  的迷向子群  $G^{\mathbf{r}} = \{g \in G | g\mathbf{r} = \mathbf{r}\}$ , 将  $G^{\mathbf{r}}$  的陪集作用在极点  $\mathbf{r}$  上, 则得到极点  $\mathbf{r}$  的  $G$  轨道。迷向子群  $G^{\mathbf{r}}$  实际为由  $C_{n_i}$  生成的群, 因此群阶为  $n_i$ , 故极点  $\mathbf{r}$  的  $G$  轨道点个数为  $n/n_i$ , 每个轨道点给出与转轴  $C_{n_i}$  等价的  $n_i$  阶转轴, 而每个  $n_i$  阶转轴给出  $(n_i - 1)$  个非恒等变换, 因此一个转轴给出的非恒等变换个数是

$$\frac{n}{n_i} (n_i - 1). \tag{4.11}$$

当取遍所有  $\ell$  条轨道时, 给出的非恒等元个数为

$$\sum_{i=1}^{\ell} \frac{n}{n_i} (n_i - 1), \tag{4.12}$$

因此该数目原则上应该等于群  $G$  中非恒等元的数目  $(n - 1)$ , 但是实际上该求和存在重复计数问题。

以  $D_3 = \{e, d, f, a, b, c\}$  为例, 极点轨道如图4.2所示。取绕过极点  $AA'$  的二次轴旋转  $\pi$  角为  $a$  元素, 考虑极点  $A$  的轨道,  $AA'$  为二次轴, 即阶为  $n_1 = 2$ , 迷向子群为  $G^A = \{e, a\}$ ,  $A$  的  $D_3$  轨道点个数为  $|D_3|/n_1 = 6/2 = 3$ , 即  $\{A, B, C\}$ , 所以极点  $A$  给出的非恒等元个数为  $(n_1 - 1)n/n_1 = 3$ , 为  $\{a, b, c\}$ ; 考虑极点  $A'$  的轨道, 二次轴阶为  $n_2 = 2$ , 迷向子群为  $G^{A'} = \{e, a\}$ ,  $A'$  的  $D_3$  轨道点同样有 3 个, 即  $\{A', B', C'\}$ , 极点  $A'$  同样给出 3 个非恒等元  $\{a, b, c\}$ , 然而  $A$  与  $A'$  的结果是重复的。取绕过极点  $LL'$  的三次轴旋转  $2\pi/3$  为  $d$  元素, 考虑极点  $L$  的轨道, 三次轴阶为  $n_3 = 3$ ,  $L$  的迷向子群为  $G^L = \{e, d, f\}$ ,  $L$  的  $D_3$  轨道为  $\{L, L'\}$ , 个数为  $n/n_3 = 2$ , 按照公式将给出  $(n_3 - 1)n/n_3 = 4$  个非恒等元素, 然而实际只有  $\{d, f\}$  两个元素, 原因是三次轴的两个极点  $\{L, L'\}$  在同一个  $D_3$  轨道, 因此两个轨道点给出相同的 2 个非恒等元素  $\{d, f\}$ 。

总而言之, 因为一个转轴会给出两个极点  $\mathbf{r}_i$  和  $-\mathbf{r}_i$ , 存在两种情况:

1. 若  $\mathbf{r}_i$  和  $-\mathbf{r}_i$  不在同一个  $G$  轨道, 对所有极点求和时,  $\mathbf{r}_i$  和  $-\mathbf{r}_i$  作为不同的极点会给出相同的非恒等元素;
2. 若  $\mathbf{r}_i$  和  $-\mathbf{r}_i$  在同一个  $G$  轨道, 极点  $\mathbf{r}_i$  的  $G$  轨道每两个轨道点给出相同的非恒等元素。

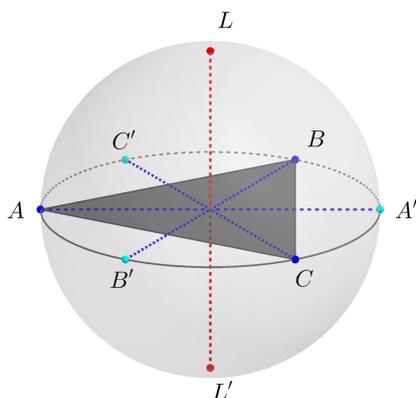


图 4.2:  $D_3$  群的极点轨道图。

因此, 以上计算非恒等元数目的过程总会存在重复计数问题, 结果需要除以 2, 即

$$\sum_{i=1}^{\ell} \frac{n}{2n_i} (n_i - 1) = n - 1. \quad (4.13)$$

这是描述第一类点群的基本方程。

■ **定理 4.4. 第一类点群基本定理** 设  $G$  是  $n$  阶的第一类点群, 其极点的集合  $S$  被分割成一条条的  $G$  轨道  $C_{r_i}$ ,  $i = 1, 2, \dots, \ell$  为  $\ell$  条不同轨道的代表点。记  $G$  在第  $i$  条轨道的代表点  $r_i$  的迷向子群为  $G^{r_i}$ , 其阶为  $n_i$ , 则第一类点群满足以下基本方程:

$$\sum_{i=1}^{\ell} \left(1 - \frac{1}{n_i}\right) = 2 \left(1 - \frac{1}{n}\right).$$

证明的过程已在前文给出。注意到  $\ell, n_i, n \in \mathbb{Z}^+$ , 且  $n_i, n \geq 2$ , 即

$$\frac{1}{2} \leq 1 - \frac{1}{n_i} \leq 1, \quad \frac{1}{2} \leq 1 - \frac{1}{n} \leq 1, \quad (4.14)$$

因此该方程只有不多的解。首先考虑两种情况:

- 若  $\ell = 1$ , 则求和变成  $1 - \frac{1}{n_1} = 2 \left(1 - \frac{1}{n}\right)$ , 因为等号左边小于 1, 等号右边大于 1, 因此不可能成立;
- 若  $\ell \geq 4$ , 则  $\sum_{i=1}^{\ell} \left(1 - \frac{1}{n_i}\right) \geq \ell/2 \geq 2$ , 而  $2 \left(1 - \frac{1}{n}\right) < 2$ , 因此不可能成立。

因此  $\ell$  只能取 2 或 3。再利用穷举方式求出所有解, 以下默认将  $n_i$  按从小到大的顺序排列  $n_1 \leq \dots \leq n_\ell$ , 且  $n_\ell \leq n$ 。

1.  $\ell = 2$ , 即

$$2 - \frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} = 2 \left(1 - \frac{1}{n}\right) \Leftrightarrow \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} = \frac{2}{n}. \quad (4.15)$$

而升序排列下有

$$\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} \geq \frac{2}{n_1} \geq \frac{2}{n}, \quad (4.16)$$

因此只可能有

$$n_1 = n_2 = n. \quad (4.17)$$

2.  $\ell = 3$ , 即

$$3 - \frac{1}{n_1} - \frac{1}{n_2} - \frac{1}{n_3} = 2 \left(1 - \frac{1}{n}\right) \Leftrightarrow \frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = 1 + \frac{2}{n}. \quad (4.18)$$

若  $n_1 \geq 3$ , 则  $\frac{1}{n_1} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} \leq 1$ , 等号右边大于 1, 等式不成立, 因此只能有  $n_1 = 2$ , 即

$$\frac{1}{2} + \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = 1 + \frac{2}{n} \Leftrightarrow \frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} = \frac{1}{2} + \frac{2}{n}. \quad (4.19)$$

若  $n_2 \geq 4$ , 则  $\frac{1}{n_2} + \frac{1}{n_3} \leq \frac{1}{2}$ , 等号后边大于  $\frac{1}{2}$ , 等式不成立, 因此  $n_2 = 2, 3$ 。

1) 若  $n_2 = 2$ , 则

$$\frac{1}{n_3} = \frac{2}{n} \Leftrightarrow n_3 = \frac{n}{2}. \quad (4.20)$$

因此  $n_1 = n_2 = 2, n_3 = n/2$  ( $n$  为偶数) 是一组解。

2) 若  $n_2 = 3$ , 则

$$\frac{1}{n_3} = \frac{1}{6} + \frac{2}{n} > \frac{1}{6}, \quad (4.21)$$

因此  $n_3 = 3, 4, 5$ , 对应三组解。

综上，第一类点群存在五种情况：

1.  $l = 2, n_1 = n_2 = n$  ( $n$  为整数)；
2.  $l = 3, n_1 = n_2 = 2, n_3 = n/2$  ( $n$  为偶数)；
3.  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = n_3 = 3, n = 12$ ；
4.  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 4, n = 24$ ；
5.  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 5, n = 60$ 。

现在对五种情况各自讨论。

(1)  $l = 2, n_1 = n_2 = n$  ( $n$  为整数)。  $n_1 = n_2 = n$  对应  $n$  阶轴，与  $S_r$  有两个交点  $\mathbf{r}$  和  $-\mathbf{r}$ ，但是没有其他元素把两个极点联系起来，因此两个极点的  $G$  轨道都只有一个轨道点  $n/n_1 = n/n_2 = 1$ ，此点群称为  $C_n$  群，如图4.3(a) 所示。

$C_n$  群都是循环群，因此是 Abel 群。常见的例子如图4.3(b) 所示，硼酸分子具有  $C_3$  的点群对称性。

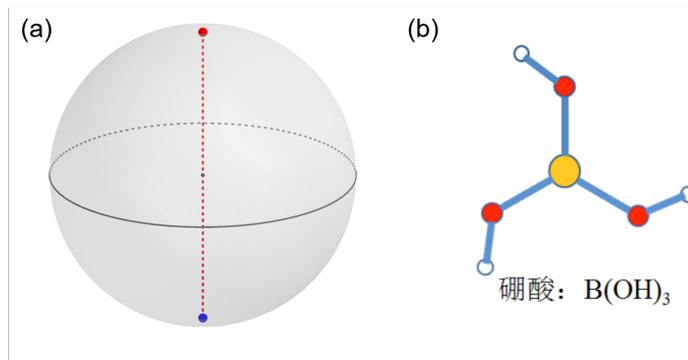


图 4.3: (a)  $C_n$  群的示意图。(b)  $C_n$  群的例子。

(2)  $l = 3, n_1 = n_2 = 2, n_3 = n/2$  ( $n$  为偶数)。记  $n = 2m$ ，则  $n_1, n_2$  对应二次轴，且  $n/n_1 = n/n_2 = m$ ，对应  $m$  个二次轴，而  $n_3 = m$  对应一个  $m$  阶轴， $n/n_3 = 2$  表明  $m$  阶轴与  $S_r$  有两个交点，且两个交点在同一个  $G$  轨道中，因此  $m$  阶轴是双向轴，此点群称为  $D_m$  群，如图4.4(a) 所示。

对  $D_m$  群而言， $m$  为奇数和偶数对应不同的情况。以  $D_3$  和  $D_4$  群为例，如图4.4(b) 所示， $m$  为奇数时， $m$  个二次轴的两个极点在不同的  $D_m$  轨道中，因此在对极点求和时出现重复计数； $m$  为偶数时， $m$  个二次轴的两个极点在同一个  $D_m$  轨道中，因此一个轨道内两个轨道点出现重复计数。

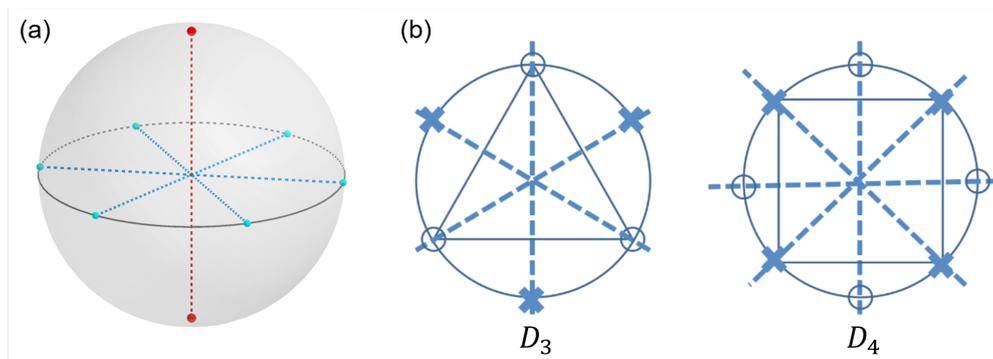


图 4.4: (a)  $D_m$  群的示意图。(b)  $D_3, D_4$  群的示意图。

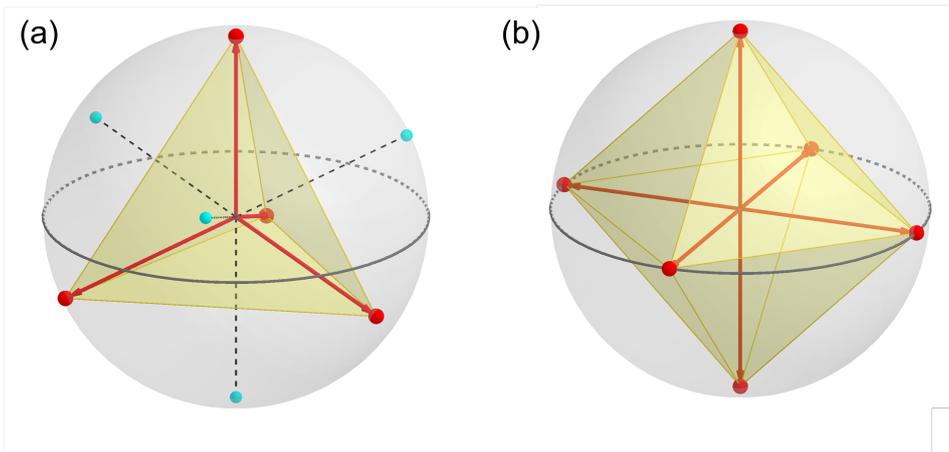


图 4.5: (a)  $T$  群和 (b)  $O$  群的示意图。

(3)  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = n_3 = 3, n = 12$ 。对于 2 阶轴  $n_1 = 2$ , 极点轨道个数为  $n/n_1 = 6$ , 但因为重复计算, 实际给出 3 个二次轴。 $n_2 = n_3 = 3$  对应三次轴,  $n/n_2 = n/n_3 = 4$ , 为 4 个单向的三次轴, 并且 4 个极点构成正四面体, 此点群称为  $T$  群, 如图 4.5(a) 所示。

(4)  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 4, n = 24$ 。二次轴  $n_1 = 2$ , 极点轨道个数为  $n/n_1 = 12$ , 有 6 个双向二次轴。三次轴  $n_2 = 3$ , 极点轨道个数为  $n/n_2 = 8$ , 有 4 个双向三次轴。四次轴  $n_3 = 4$ , 极点轨道个数为  $n/n_3 = 6$ , 有 3 个双向四次轴, 并且 6 个极点轨道构成正八面体, 此点群称为  $O$  群, 如图 4.5(b) 所示。正八面体由 8 个正三角形组成, 以所有正三角形的中心为顶点, 正八面体能内嵌一个正六面体, 即立方体。两种图形互为对偶图形, 因此  $O$  群是描述正八面体和立方体的旋转对称群。

(5)  $l = 3, n_1 = 2, n_2 = 3, n_3 = 5, n = 60$ 。二次轴  $n_1 = 2$ , 极点轨道个数为  $n/n_1 = 30$ , 有 15 个双向二次轴。三次轴  $n_2 = 3$ , 极点轨道个数为  $n/n_2 = 20$ , 有 10 个双向三次轴。五次轴  $n_3 = 5$ , 极点轨道个数为  $n/n_3 = 12$ , 给出 6 个五次轴, 实际上 12 个极点构成正二十面体, 此点群称为  $Y$  群, 如图 4.6(a) 所示。正二十面体由 20 个正三角形组成, 以所有正三角形的中心为顶点, 正二十面体能内嵌一个正十二面体, 如图 4.6(b) 所示。两种图形互为对偶图形, 因此  $Y$  群是描述正二十面体和正十二面体的旋转对称群。

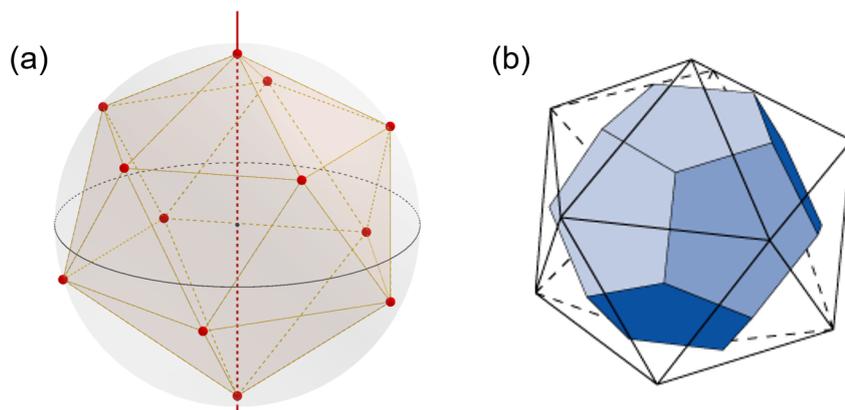


图 4.6: (a)  $Y$  群的示意图。(b) 正二十面体与正十二面体的关系。

### 4.3 第二类点群

在得到所有第一类点群后, 我们通过**定理 4.3** 构造第二类点群。第二类点群被分为两类:

1. 显含中心反演元素  $I$ : 利用第一类点群  $G = K$  与空间反演群  $\{E, I\}$  做直积, 可得到显含  $I$  的第二类

点群, 分别为

$$C_n \cup IC_n, D_n \cup ID_n, T \cup IT, O \cup IO, Y \cup IY.$$

2. 不显含中心反演元素  $I$ : 在一些存在指数为 2 的不变子群  $K$  的第一类点群  $G^+$  中, 利用  $K \cup IK^+$  可构造不显含  $I$  的第二类点群, 因为  $K^+ = G - K$  为  $K$  的陪集,  $I = IE$  并不在其中。这种第二类点群的特点是它们会和第一类点群同构, 即

$$G^+ = \{K, K^+\} \cong G = \{K, IK^+\}. \quad (4.22)$$

在五种第一类点群  $C_n, D_n, T, O, Y$  中, 存在四种  $G^+$  和  $K$ , 分别为

$$\begin{aligned} C_{2n} (K = C_n), D_n (K = C_n), \\ D_{2n} (K = D_n), O (K = T). \end{aligned}$$

因此, 第二类点群与第一类点群有如下关系:

[I]	[II, 中]	[II, 非中]
$C_n$	$C_n \cup IC_n$	与 $C_{2n}$ 同构
$D_n$	$D_n \cup ID_n$	与 $D_n$ 同构
$T$	$T \cup IT$	与 $D_{2n}$ 同构
$O$	$O \cup IO$	与 $O$ 同构
$Y$	$Y \cup IY$	

其中 [I] 表示第一类点群, [II, 中] 与 [II, 非中] 分别表示显含与不显含中心反演元素  $I$  的第二类点群。

在对第二类点群命名前, 先引进熊夫利 (Schoenflies) 记号, 这是利用旋转反射面命名第二类点群的描述, 其思路是从第一类点群 ( $K$ ) 出发, 加一个标记表示陪集代表元 ([II, 中] 是  $IK$  中的元素, [II, 非中] 是  $IK^+$  中的元素), 因为第二类点群的群元个数是相应的第一类点群的两倍。注意对于 [II, 非中], 从第一类点群出发, 是指从指数为 2 的不变子群  $K$  出发, 而非从与第二类点群同构的第一类点群  $G^+$  本身出发。反射面由其法线  $\mathbf{k}$  描述, 反射操作可以表示为  $\sigma_{\mathbf{k}} = IC_{\mathbf{k}}(\pi)$ 。熊夫利记号的命名规则为根据反射面与主轴和垂直主轴的二阶轴间的关系来命名反射面, 如图 4.7 所示, 分为  $\sigma_v, \sigma_h, \sigma_d$  三种反射面:

1.  $\sigma_v$  (vertical): 反射面包含主轴;
2.  $\sigma_h$  (horizontal): 反射面垂直于主轴;
3.  $\sigma_d$  (diagonal): 反射面包含主轴, 且平分与主轴垂直的二阶轴间的夹角。

接下来考虑所有第二类点群的情况。

### 1. $T \cup IT$

$T$  群有三个二次轴, 因此  $IT$  中有三个反射面, 对应元素  $\{IC_2^{(1)}, IC_2^{(2)}, IC_2^{(3)}\}$ 。取任一个  $IC_2^{(i)}$  为陪集代表元, 二次轴为主轴, 则反射面垂直于主轴, 即  $\sigma_h = IC_2^{(i)}$ , 因此取  $\sigma_h$  为陪集代表元可描述陪集  $\sigma_h T$ , 此第二类点群记为  $T_h = T \cup \sigma_h T$ , 它包含 24 个元素。注意  $T_h$  群并不是正四面体的完全对称群, 因为正四面体不具有中心反演对称性。

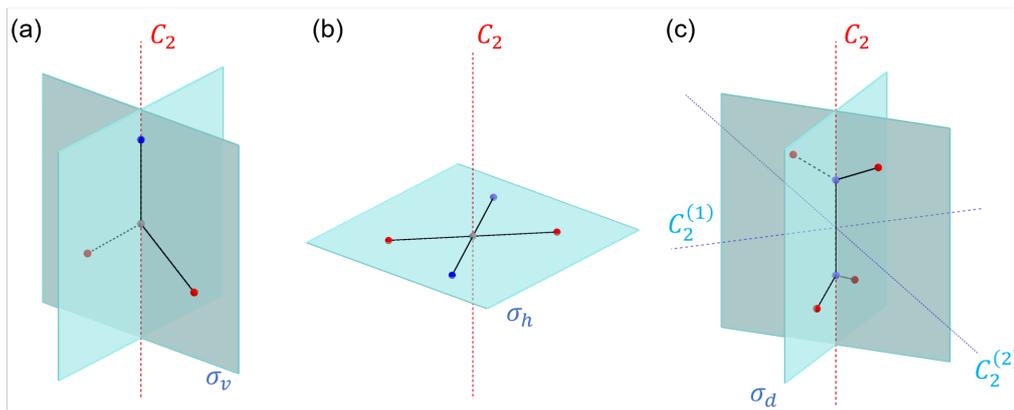


图 4.7: 三种反射面的定义。

2.  $O \cup IO$

$O$  群有四次轴, 取四次轴为主轴,  $IC_4^2 = \sigma_h$ , 因此  $\sigma_h$  可描述陪集  $\sigma_h O$ , 此第二类点群记为  $O_h = O \cup \sigma_h O$ , 它包含 48 个元素。 $O_h$  群是正八面体的完全对称群。

3.  $Y \cup IY$

$Y$  群有 15 个二次轴, 取其为转轴,  $IC_2 = \sigma_h$ , 因此  $\sigma_h$  可描述陪集  $\sigma_h Y$ , 此第二类点群记为  $Y_h = Y \cup \sigma_h Y$ , 它包含 120 个元素。

4. 与  $D_n$  同构的第二类点群

这种第二类点群的对称操作为

$$\left\{ \{C_n, C_n^2, \dots, C_n^{n-1}, C_n^n = E\}, I \{C_2^{(0)}, C_2^{(1)}, \dots, C_2^{(n-1)}\} \right\},$$

纯转动部分为  $K = C_n$  群。二次轴方向为反射面的法线方向, 因为  $n$  次轴与二次轴垂直, 取  $n$  次轴为主轴, 反射面则包含主轴, 因此  $IC_2^{(i)} = \sigma_v$  可描述陪集, 此第二类点群记为  $C_{nv}$ 。

注意虽然  $C_{nv}$  与  $D_n$  同构, 但是由于是由  $K = C_n$  生成的, 因此是由  $C_n$  加上描述陪集代表元  $\sigma_v$  得到记号  $C_{nv}$ 。

5.  $C_n \cup IC_n, n$  为偶数

此时记  $n = 2k$ , 因为  $IC_{2k}^k = \sigma_h$ , 因此取  $2k$  次轴为主轴, 反射面垂直于主轴, 记为  $C_{2kh} = C_{2k} \cup \sigma_h C_{2k}$ 。

6.  $C_n \cup IC_n, n$  为奇数

当  $n = 2k + 1$  为奇数时, 不存在反射面。以  $C_3$  为例 ( $k = 1$ ), 如图4.8所示, 在  $C_3$  下, 顶点间有轮换  $1 \rightarrow 3 \rightarrow 5 \rightarrow 1$  和  $2 \rightarrow 4 \rightarrow 6 \rightarrow 2$ , 而中心反演操作则互换相应顶点, 即  $1 \leftrightarrow 4, 2 \leftrightarrow 5, 3 \leftrightarrow 6$ 。而从顶点 1 出发到达所有 6 个顶点则对应  $C_3 \cup IC_3 = \{ \{E, C_3, C_3^2\}, I \{E, C_3, C_3^2\} \}$  的所有元素。注意到从顶点 1 出发可以通过一种操作及其幂次到达所有顶点, 该操作为先绕主轴旋转  $2\pi/6 = \pi/3$ , 再以垂直于主轴的反射面进行反射操作, 即为旋转反射操作  $S_6 = \sigma_h C_6$ 。在该操作下, 有

$$1 \xrightarrow{S_6} 2 \xrightarrow{S_6} 3 \xrightarrow{S_6} 4 \xrightarrow{S_6} 5 \xrightarrow{S_6} 6 \xrightarrow{S_6} 1,$$

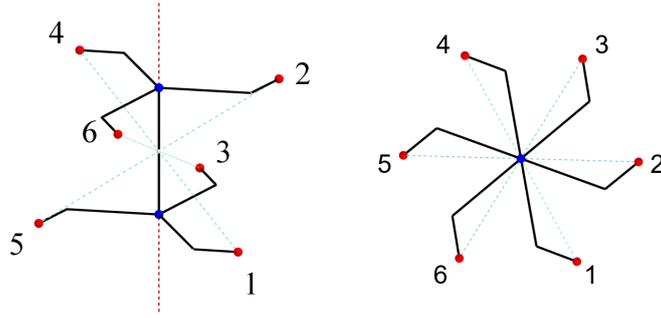


图 4.8:  $S_6 = C_3 \cup IC_3$  群示意图。

因此  $C_3 \cup IC_3$  是由旋转反射操作  $S_6$  生成的循环群。容易验证

$$\begin{aligned} S_6 &= \sigma_h C_6 = IC_6^3 C_6 = IC_6^4 = IC_3^2, \\ S_6^2 &= (\sigma_h C_6)^2 = \sigma_h^2 C_6^2 = C_3, \\ S_6^3 &= S_6 S_6^2 = IC_3^2 C_3 = I, \\ S_6^4 &= S_6 S_6^3 = IC_3^2 I = C_3^2, \\ S_6^5 &= S_6^2 S_6^3 = IC_3, \\ S_6^6 &= S_6^3 S_6^3 = E. \end{aligned}$$

对于一般的  $C_{2k+1} \cup IC_{2k+1}$  群，则可以使用转动反射操作  $S_{4k+2}$  生成，因为

$$\begin{aligned} S_{4k+2}^{2m} &= \sigma_h^{2m} C_{4k+2}^{2m} = C_{2k+1}^m, \\ S_{4k+2}^{2m+1} &= S_{4k+2}^{2m} S_{4k+2} \\ &= C_{2k+1}^m \sigma_h C_{4k+2} \\ &= C_{2k+1}^m IC_{4k+2}^{2k+1} C_{4k+2} \\ &= IC_{2k+1}^m C_{2k+1}^{k+1} \\ &= IC_{2k+1}^{m+k+1}, \end{aligned}$$

因此当  $m$  取遍  $0, 1, 2, \dots, 4k+1$  时， $S_{4k+2}^m$  给出  $C_{2k+1} \cup IC_{2k+1}$  的所有元素。此第二类点群记为  $S_{4k+2}$ ，即

$$S_{4k+2} = C_{2k+1} \cup IC_{2k+1} = \{(\sigma_h C_{4k+2})^m \mid m = 0, 1, \dots, 4k+1\}. \tag{4.23}$$

### 7. 与 $C_{4n+2}$ 同构的第二类点群

这是与  $C_{2m}$  同构的第二类点群的特殊情况，这种第二类点群的对称操作为

$$\left\{ \left\{ C_{4n+2}^2, C_{4n+2}^4, \dots, C_{4n+2}^{4n}, C_{4n+2}^{4n+2} = E \right\}, I \left\{ C_{4n+2}, C_{4n+2}^3, \dots, C_{4n+2}^{2n+1}, \dots, C_{4n+2}^{4n+1} \right\} \right\},$$

纯转动部分为  $K = C_{2n+1}$ 。特殊之处在于陪集中存在垂直主轴的反射面，即  $\sigma_h = IC_{4n+2}^{2n+1}$ ，因此记此第二类点群为  $C_{(2n+1)h}$ ，与第 5 种情况统一为  $C_{nh}$ 。

### 8. 与 $C_{4n}$ 同构的第二类点群

这是与  $C_{2m}$  同构的第二类点群的其余情况, 这种第二类点群的对称操作为

$$\{ \{ C_{4n}^2, C_{4n}^4, \dots, C_{4n}^{4n-2}, C_{4n}^{4n} = E \}, I \{ C_{4n}, C_{4n}^3, \dots, C_{4n}^{4n-1} \} \},$$

纯转动部分为  $K = C_{2n}$ 。这种情况下虽然陪集中无反射面, 但是所有群元可用转动反射操作  $S_{4n} = \sigma_h C_{4n}$  生成, 因为

$$S_{4n}^{2m} = \sigma_h^{2m} C_{4n}^{2m} = C_{4n}^{2m},$$

当  $m$  取遍  $0, 1, 2, \dots, 2n-1$  时,  $S_{4n}^{2m}$  给出纯转动部分  $K = C_{2n}$  的所有元素。而

$$\begin{aligned} S_{4n}^{2m+1} &= C_{2n}^m S_{4n} \\ &= C_{2n}^m \sigma_h C_{4n} \\ &= C_{2n}^m I C_{4n}^{2n} C_{4n} \\ &= I C_{4n}^{2m+2n+1}, \end{aligned}$$

当  $m$  取遍  $0, 1, 2, \dots, 2n-1$  时,  $S_{4n}^{2m+1}$  给出陪集  $I(C_{4n} - K)$  的所有元素。此第二类点群记为

$$S_{4n} = \{ (\sigma_h C_{4n})^m \mid m = 0, 1, \dots, 4n-1 \}. \quad (4.24)$$

我们可将第 6 种和第 8 种情况统一为

$$S_{2n} = \{ (\sigma_h C_{2n})^m \mid m = 0, 1, \dots, 2n-1 \}. \quad (4.25)$$

现在考虑  $S_{2n+1}$  的情况, 因为

$$S_{2n+1} = \sigma_h C_{2n+1} = I C_{4n+2}^{2n+1} C_{2n+1} = I C_{4n+2}^{2n+3},$$

因此  $S_{2n+1}$  是  $4n+2$  阶元素, 因此

$$S_{2n+1} = \{ (\sigma_h C_{2n+1})^m \mid m = 0, 1, \dots, 4n+1 \}, \quad (4.26)$$

然而可以发现

$$S_{2n+1}^{2n+1} = \sigma_h^{2n+1} C_{2n+1}^{2n+1} = \sigma_h, \quad S_{2n+1}^{2n+2} = \sigma_h S_{2n+1} = C_{2n+1},$$

所以  $S_{2n+1}$  实际上为第 7 种情况的  $C_{(2n+1)h} = S_{2n+1}$ 。

### 9. $D_{2n} \cup ID_{2n}$

这种情况下陪集中存在垂直轴的反射面  $\sigma_h = I C_{2n}^n$ , 记这种第二类点群为  $D_{2nh} = D_{2n} \cup ID_{2n}$ 。

### 10. 与 $D_{4n+2}$ 同构的第二类点群

这是与  $D_{2m}$  同构的第二类点群的特殊情况, 纯转动部分为

$$K = D_{2n+1} = \{ C_{4n+2}^2, C_{4n+2}^4, \dots, C_{4n+2}^{4n}, C_{4n+2}^{4n+2} = E, C_2^{(0)}, C_2^{(2)}, \dots, C_2^{(4n)} \},$$

陪集为

$$I(D_{4n+2} - D_{2n+1}) = I \{ C_{4n+2}, C_{4n+2}^3, \dots, C_{4n+2}^{2n+1}, \dots, C_{4n+2}^{4n+1}, C_2^{(1)}, C_2^{(3)}, \dots, C_2^{(4n+1)} \}.$$

陪集中包含  $\sigma_h = I C_{4n+2}^{2n+1}$ , 记此第二类点群为  $D_{(2n+1)h}$ , 可与第 9 种情况统一为  $D_{nh}$ 。

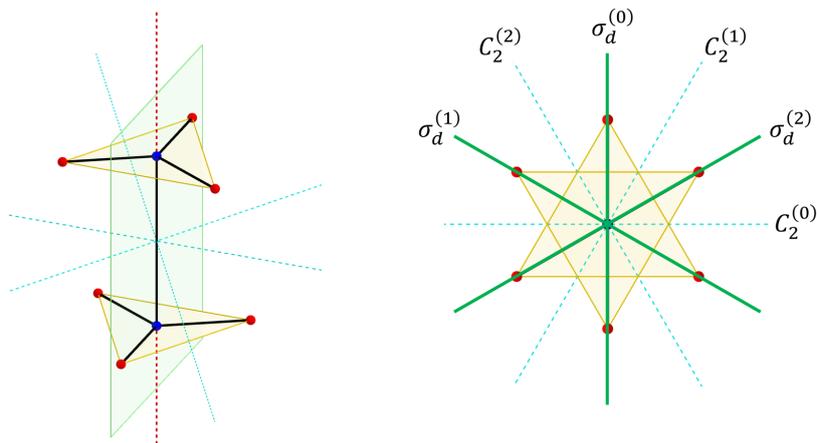


图 4.9:  $D_{3d} = D_3 \cup ID_3$  示意图。

11.  $D_{2n+1} \cup ID_{2n+1}$

这种情况下陪集中不存在垂直主轴的反射面，但是存在  $2n + 1$  个  $IC_2^{(i)}$ ，因为二次轴与主轴垂直，因此这些反射面是包含主轴的。不仅如此，二面体群满足

$$C_2^{(i)} C_2^{(i-1)} [C_2^{(i)}]^{-1} = C_2^{(i+1)} \rightarrow [IC_2^{(i+1)}] C_2^{(i)} [IC_2^{(i)}]^{-1} = C_2^{(i+1)}, \quad (4.27)$$

因此反射操作联系起这些二次轴，故反射面平分二次轴间的夹角，因此记为  $\sigma_d = IC_2^{(i)}$ ，此第二类点群记为  $D_{(2n+1)d}$ 。以  $D_{3d}$  为例，其具有三个包含三次轴主轴的反射面  $\sigma_d^{(i)} = IC_2^{(i)}$ ，如图4.9所示，这些反射面皆平分二次轴的夹角。

12. 与  $D_{4n}$  同构的第二类点群

这是与  $D_{2m}$  同构的第二类点群的其余情况，纯转动部分为

$$K = D_{2n} = \{C_{4n}^2, C_{4n}^4, \dots, C_{4n}^{4n-2}, C_{4n}^{4n} = E, C_2^{(0)}, C_2^{(2)}, \dots, C_2^{(4n-2)}\},$$

陪集为

$$I(D_{4n} - D_{2n}) = I\{C_{4n}, C_{4n}^3, \dots, C_{4n}^{4n-1}, C_2^{(1)}, C_2^{(3)}, \dots, C_2^{(4n-1)}\},$$

陪集中存在包含主轴的反射面  $IC_2^{(i)}$ ，而陪集中的反射操作联系其  $K = D_{2n}$  中的二次轴：

$$[IC_2^{(2k+1)}] C_2^{(2k)} [IC_2^{(2k+1)}]^{-1} = C_2^{(2k+2)}, \quad (4.28)$$

因此反射面平分二次轴夹角，故  $\sigma_d = IC_2^{(i)}$ ，此第二类点群记为  $D_{2nd}$ ，可与第 11 种情况统一为  $D_{nd}$ 。

13. 与  $O$  同构的第二类点群

$O$  群指数为 2 的不变子群为  $T$  群，构造  $T \cup I(O - T)$ 。如图4.10(a) 所示， $T$  群操作保持正方体中嵌套的正四面体  $ABCD$  不变，而剩余操作  $(O - T)$  将正四面体  $ABCD$  变换为正方体中嵌套的另一个正四面体  $A'B'C'D'$ ，即图4.10(b) 中的红色正四面体。考虑  $O$  群中的  $C_2^{(1)}$  操作，即绕正方体对棱中点连线旋转  $\pi$  的操作，该操作并不保持正四面体不变，因此  $C_2^{(1)} \in (O - T)$ 。在此第二类点群的陪集  $I(O - T)$  中，如图4.10(a)-(c) 所示，联合操作  $IC_2^{(1)}$  将正四面体  $ABCD$  的其中两个顶点对换，因此是一个保持正四面体不变的反射操作，并且该反射面平分正四面体对边中点连线的二次轴夹角（见图4.10(d)），因此  $\sigma_d = IC_2^{(1)}$ ，故此第二类点群记为  $T_d$  群，具有 24 个元素。

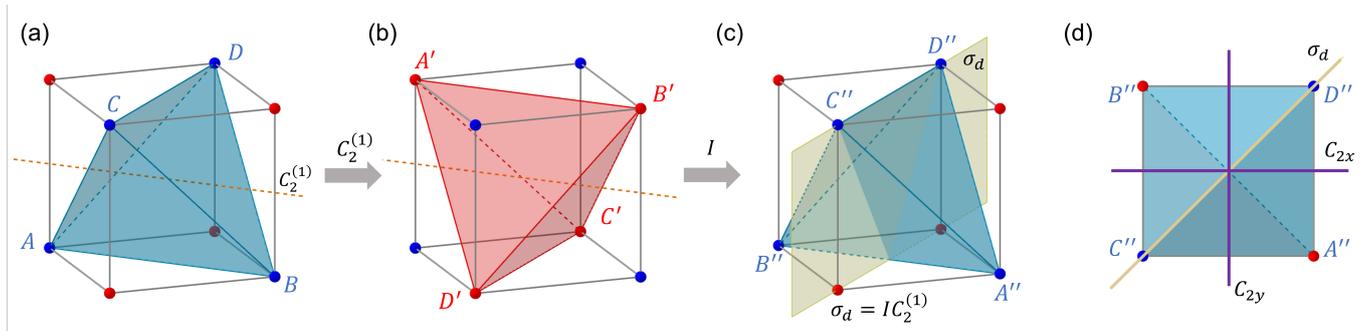


图 4.10:  $T_d = T \cup I(O - T)$  示意图。

$T_d$  群是正四面体的完全对称群，并且  $T_d$  群每个元素与正四面体四个顶点间的置换操作一一对应，因此也同构与 4 阶置换群，即

$$T_d \cong O \cong S_4. \tag{4.29}$$

总而言之，第二类点群一共有九种情况，如表4.1所示。

1	$S_{2n}$	$S_{4n+2} = C_{2n+1} \cup IC_{2n+1}$ $S_{4n} = C_{2n} \cup I(C_{4n} - C_{2n})$
2	$C_{nh}$	$C_{2nh} = C_{2n} \cup IC_{2n}$ $C_{(2n+1)h} = C_{2n+1} \cup I(C_{4n+2} - C_{2n+1})$
3	$D_{nh}$	$D_{2nh} = D_{2n} \cup ID_{2n}$ $D_{(2n+1)h} = D_{2n+1} \cup I(D_{4n+2} - D_{2n+1})$
4	$D_{nd}$	$D_{2nd} = D_{2n} \cup I(D_{4n} - D_{2n})$ $D_{2n+1} \cup ID_{2n+1}$
5	$C_{nv}$	$C_n \cup I(D_n - C_n)$
6	$T_h$	$T \cup IT$
7	$O_h$	$O \cup IO$
8	$Y_h$	$Y \cup IY$
9	$T_d$	$T \cup I(O - T)$

表 4.1: 9 种第二类点群。

### 特殊点群

按照定义，点群为  $O(3)$  群的有限子群，其中的对称操作至少保持一个点不变。在化学上，一般使用点群描述分子的对称性，如水分子具有  $C_{2v}$  群的对称性。然而在描述一些线性分子的对称性时，我们发现  $O(3)$  群的有限子群不能完全描述这些分子的对称性，而是需要其无限子群，因为线性分子在绕分子所在轴旋转任意角度后都是不变的。因此也将这部分无限子群称为特殊点群。

1. 纯转动特殊点群：按照点群分类的做法，我们先考虑不含中心反演部分。因为第一类点群的五种分类中，有三种对群阶  $n$  有明确限制，对应  $T$  群 ( $n = 12$ )， $O$  群 ( $n = 24$ )，和  $Y$  群 ( $n = 60$ )，然而另

外两种情况, 即

$$(1) \ell = 2, n_1 = n_2 = n,$$

$$(2) \ell = 3, n_1 = n_2 = 2, n_3 = n/2,$$

对群阶没有很强的约束, 因此令  $n \rightarrow \infty$  得到无限群情况。

1) 第一种情况在极限  $n \rightarrow \infty$  下, 从  $C_n$  群变为  $C_\infty$ , 存在球面  $S_r$  上存在两个极点, 并且没有其余操作联系起两个极点, 此时的  $C_\infty$  群实际上就是定轴旋转群  $SO(2)$ 。

2) 第二种情况在极限  $n \rightarrow \infty$  下, 从  $D_n$  群变为  $D_\infty$  群, 除了有一个无穷次轴外, 还有与此正交的二次轴。同时  $D_n$  群可以写为  $D_n = C_n \cup C_2^{(1)} C_n$ , 同样地, 也有  $D_\infty = C_\infty \cup C_2^{(1)} C_\infty$ , 我们知道  $C_\infty = SO(2)$  中任意元素在  $\mathbb{R}^2$  (即自身表示) 中表示矩阵为

$$R(\theta) = \begin{pmatrix} \cos \theta & -\sin \theta \\ \sin \theta & \cos \theta \end{pmatrix}, \quad (4.30)$$

而取  $C_2^{(1)}$  为绕  $x$  轴旋转  $\pi$  的操作, 对应的表示矩阵为

$$P = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \det P = -1, \quad (4.31)$$

因此作为矩阵群,  $D_\infty$  可表示为  $D_\infty = SO(2) \cup PSO(2)$ 。

2. 非纯转动特殊点群: 得到两个特殊点群  $C_\infty$  和  $D_\infty$  后, 可以得到相应的非纯转动点群, 分别为  $C_{\infty v} = C_\infty \cup I(D_\infty - C_\infty)$ , 以及  $D_{\infty h} = D_\infty \cup ID_\infty$ 。注意对于线性分子,  $C_\infty \cup IC_\infty$  实际为  $D_\infty$ , 因此分子点群没有  $C_{\infty h}$ 。  $D_{\infty h}$  实际上既具有包含主轴的反射面  $\sigma_v = IC_2$ , 又具有垂直主轴的反射面  $\sigma_h = IC_2^{(1)}$ , 还具有中心反演对称性  $I$ , 因此  $D_{\infty h}$  是这种特殊无限点群里对称性最高的。

#### 4.4 晶体点群和空间群

在固体物理中, 晶体系统是一类非常重要的系统, 由全同的、无限重复的原子构成。在本节中, 我们将考虑保持晶体本身不变的转动对称性以及平移对称性。晶体系统无限重复的平移结构可被抽象为晶格。

§ 定义 4.4. 晶格 (*Lattice*) 将一个平行六面体在三维空间三个方向上作无限扩展形成的无限大的格点系统称为晶格。

晶格中的任意格点  $\mathbf{R}_n \in L$ , 都能表示为三个线性无关的基本向量 (晶格基矢量)  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  的线性叠加:

$$\mathbf{R}_n = n_1 \mathbf{a}_1 + n_2 \mathbf{a}_2 + n_3 \mathbf{a}_3, \quad (4.32)$$

其中  $n_i$  都为整数, 因此取定基本矢量后,  $L$  中每个格点 (格矢)  $\mathbf{R}_n$  都能用一组整数  $n = (n_1, n_2, n_3)$  唯一标定。

在晶格的基础上, 存在让晶格保持不变的转动或转动反演操作, 这些操作的集合构成  $O(3)$  群的有限子群, 并且此类有限子群都为点群, 称为晶体点群。

§ 定义 4.5. 晶体点群 将晶格映为自身的点群, 即保持原点不动的有限实正交群。

注. 晶体点群中没有平移操作, 因为平移操作不满足至少保持一个点不变的性质。

**定理 4.2** 表明点群  $G$  均由绕定轴  $\mathbf{k}$  转动的元素  $C_{\mathbf{k}}(2\pi/n)$  生成, 进一步地, 晶体无限重复的要求将进一步限制生成晶体点群的元素类型, 即限制转轴的次数  $n$ , 其结果为以下定理。

■ **定理 4.5. 晶体制约定理** 设  $G$  是晶体点群, 则  $G$  中的转动元素只可能由  $C_1(E), C_2, C_3, C_4, C_6$  转动轴生成,  $G$  中的转动反演元素只可能由  $I, IC_2, IC_3, IC_4, IC_6$  生成。

证明. 设晶格  $L$  是  $G$  不变的,  $L$  的基本向量是  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ , 则  $\forall g \in G$ , 有

$$g\mathbf{a}_i = \sum_{j=1}^3 c_{ji}(g) \mathbf{a}_j, \quad (4.33)$$

由于  $g\mathbf{a}_i \in L$ , 展开系数  $c_{ji}(g)$  皆为整数。另一方面,  $G$  是  $O(3)$  的子群, 取  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  为三个基向量, 上式给出  $G$  以  $L$  为表示空间的群表示, 即

$$A^L(g) \mathbf{a}_i = \sum_{j=1}^3 A_{ji}^L(g) \mathbf{a}_j, \quad A_{ji}^L(g) = c_{ji}(g), \quad (4.34)$$

即  $c(g)$  的系数矩阵为  $g$  的表示矩阵。

因为  $\mathbf{a}_i$  是  $\mathbb{R}^3$  的三个线性无关向量,  $G$  在  $\mathbb{R}^3$  中以  $L$  为基矢和以  $(\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k})$  为基矢给出两个表示  $A^L$  和  $A^3$  为等价表示, 因为二者的基矢量间存在可逆的线性变换  $Q$ , 满足

$$(\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3) = (\mathbf{i}, \mathbf{j}, \mathbf{k}) Q, \quad (4.35)$$

因此群元  $g$  在  $A^L$  和  $A^3$  两个表示下的特征标相等。已知任意  $O(3)$  中群元  $g$  在自身表示中的特征标为

$$\chi^3(g) = \pm(1 + 2 \cos \phi), \quad (4.36)$$

其中  $\phi$  表示  $g$  中转动部分的转角, 若  $g \in SO(3)$  则取正号, 否则取负号。而在  $A^L$  表示中的特征标为

$$\chi^L(g) = \sum_{i=1}^3 c_{ii}(g) \in \mathbb{Z}, \quad (4.37)$$

即特征标为整数。因此联立二式得到晶格体系对转角的约束方程为

$$\pm(1 + 2 \cos \phi) \in \mathbb{Z}, \quad (4.38)$$

解得  $\phi = 0, \pi/3, \pi/2, 2\pi/3, \pi$ 。因此纯转动只能为  $C_1(E), C_2, C_3, C_4, C_6$ , 转动反演只能为  $I, IC_2, IC_3, IC_4, IC_6$ 。□

结合晶体制约定理和点群的分类, 我们可以得到所有晶体点群:

1. 第一类点群中满足制约定理的  $C_n$  群有  $C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ ,  $D_n$  群有  $D_2, D_3, D_4, D_6$ , 以及  $T$  和  $O$ 。
2.  $S_{2n}$  群:  $S_{4n+2} = C_{2n+1} \cup IC_{2n+1}$ ,  $n = 0, 1$  给出  $S_2, S_6$ ;  $S_{4n} = C_{2n} \cup I(C_{4n} - C_{2n})$ ,  $n = 1$  给出  $S_4$ , 否则陪集至少包含为 8 阶转动反演。
3.  $C_{nv}$  群:  $C_n \cup I(D_n - C_n)$ ,  $n = 2, 3, 4, 6$  给出  $C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$ 。

第一类点群	$C_1, C_2, C_3, C_4, C_6$ $D_2, D_3, D_4, D_6$ $O, T$
第二类点群	$S_2, S_4, S_6$ $C_{2v}, C_{3v}, C_{4v}, C_{6v}$ $C_{1h}, C_{2h}, C_{3h}, C_{4h}, C_{6h}$ $D_{2h}, D_{3h}, D_{4h}, D_{6h}$ $D_{2d}, D_{3d}$ $T_h, O_h, T_d$

表 4.2: 32 个晶体点群。

- $C_{nh}$  群:  $C_{2nh} = C_{2n} \cup IC_{2n}$ ,  $n = 1, 2, 3$  给出  $C_{2h}, C_{4h}, C_{6h}$ ;  $C_{(2n+1)h} = C_{2n+1} \cup I(C_{4n+2} - C_{2n+1})$ ,  $n = 0, 1$  给出  $C_{1h}, C_{3h}$ , 否则陪集至少包含 10 阶转动反演。
- $D_{nh}$  群:  $D_{2nh} = D_{2n} \cup ID_{2n}$ ,  $n = 1, 2, 3$  给出  $D_{2h}, D_{4h}, D_{6h}$ ;  $D_{(2n+1)h} = D_{2n+1} \cup I(D_{4n+2} - D_{2n+1})$ ,  $n = 1$  给出  $D_{3h}$ 。
- $D_{nd}$  群:  $D_{2nd} = D_{2n} \cup I(D_{4n} - D_{2n})$ ,  $n = 1$  给出  $D_{2d}$ ;  $D_{(2n+1)d} = D_{2n+1} \cup ID_{2n+1}$ ,  $n = 1$  给出  $D_{3d}$ 。
- $T_h = T \cup IT$ 。
- $O_h = O \cup IO$ 。
- $T_d = T \cup I(O - T)$ 。

因此一共有 32 个晶体点群，如表 4.2 所示。具有相同晶体点群的晶体，会存在一些共同特征，将在后文讲述。

我们可以按照对称元素的相似性对 32 个晶体点群进行划分。如具有  $T, O, T_d, T_h, O_h$  这五个点群对称性的晶体，都具有 4 个三阶轴，使得  $x, y, z$  轴等价，因此可将这五个点群归为同一类。依照早期晶体学研究的惯例，将对称元素相似的点群归类，每一类则称为一个晶系。上述五个点群因  $x, y, z$  轴等价，属于立方晶系。以下将给出七大晶系的定义，并对 32 个晶体点群进行晶系分类。

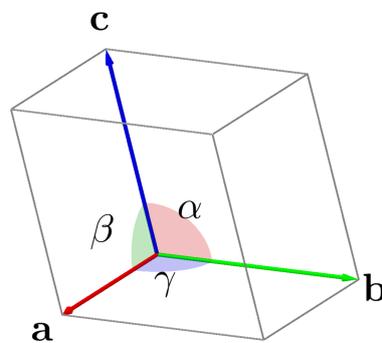


图 4.11: 晶胞参数关系。

晶胞是反映晶体对称性的最小结构单元，晶胞由 6 个晶胞参数  $a, b, c, \alpha, \beta, \gamma$  描述，如图 4.11 所示，不同的晶胞参数给出不同的晶系。以下默认  $n = |\mathbf{n}|$  表示矢量的模长。

**(1) 三斜晶系 (Triclinic)**

此晶系只存在一阶转动轴或一阶转动反演轴，晶胞参数取为

$$a \neq b \neq c, \alpha, \beta, \gamma \neq 90^\circ. \quad (4.39)$$

对应的晶体点群为  $C_1$  和  $S_2$ 。有时也将  $S_2$  记为  $C_i = \{E, I\}$ 。

**(2) 单斜晶系 (Monoclinic)**

此晶系只存在一个二阶转动轴或二阶转动反演轴，晶胞参数取为

$$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma \neq 90^\circ. \quad (4.40)$$

对应的晶体点群有  $C_2$ ,  $C_2 \cup IC_2 = C_{2h}$ , 及  $C_1 \cup I(C_2 - C_1) = C_{1h}$ 。

**(3) 正交晶系 (Orthorhombic)**

此晶系存在三个相互垂直的二阶转动轴或二阶转动反演轴，晶胞参数取为

$$a \neq b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ. \quad (4.41)$$

对应的晶体点群有  $D_2$ ,  $D_2 \cup ID_2 = D_{2h}$ , 及  $C_2 \cup I(D_2 - C_2) = C_{2v}$ 。

**(4) 四方晶系 (Tetragonal)**

此晶系在唯一高阶轴方向存在四阶转动轴或四阶转动反演轴，晶胞参数取为

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ. \quad (4.42)$$

对应的晶体点群有  $C_4$ ,  $D_4$ ,  $C_4 \cup IC_4 = C_{4h}$ ,  $C_2 \cup I(C_4 - C_2) = S_4$ ,  $D_4 \cup ID_4 = D_{4h}$ ,  $C_4 \cup I(D_4 - C_4) = C_{4v}$ , 及  $D_2 \cup I(D_4 - D_2) = D_{2d}$ 。

**(5) 三角晶系 (Trigonal)**

此晶系在唯一高阶轴方向存在三阶转动轴或三阶转动反演轴，晶胞参数可取为

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ. \quad (4.43)$$

对应的晶体点群有  $C_3$ ,  $D_3$ ,  $C_3 \cup IC_3 = S_6$ ,  $D_3 \cup ID_3 = D_{3d}$ , 及  $C_3 \cup I(D_3 - C_3) = C_{3v}$ 。如图4.12所示，通常三角晶系也有另一种取晶胞的方式，此时的晶胞参数为

$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma \neq 90^\circ. \quad (4.44)$$

**(6) 六角晶系 (Hexagonal)**

此晶系在唯一高阶轴方向存在六阶转动轴或六阶转动反演轴，晶胞参数取为

$$a = b \neq c, \alpha = \beta = 90^\circ, \gamma = 120^\circ. \quad (4.45)$$

对应的晶体点群有  $C_6$ ,  $D_6$ ,  $C_6 \cup IC_6 = C_{6h}$ ,  $C_3 \cup I(C_6 - C_3) = C_{3h}$ ,  $D_6 \cup ID_6 = D_{6h}$ ,  $C_6 \cup I(D_6 - C_6) = C_{6v}$ , 及  $D_3 \cup I(D_6 - D_3) = D_{3h}$ 。当三角晶系取第一种晶胞参数时 (图4.12(a))，无法从晶胞参数上区分三角晶系和六角晶系，只能从主轴的对称性体现。

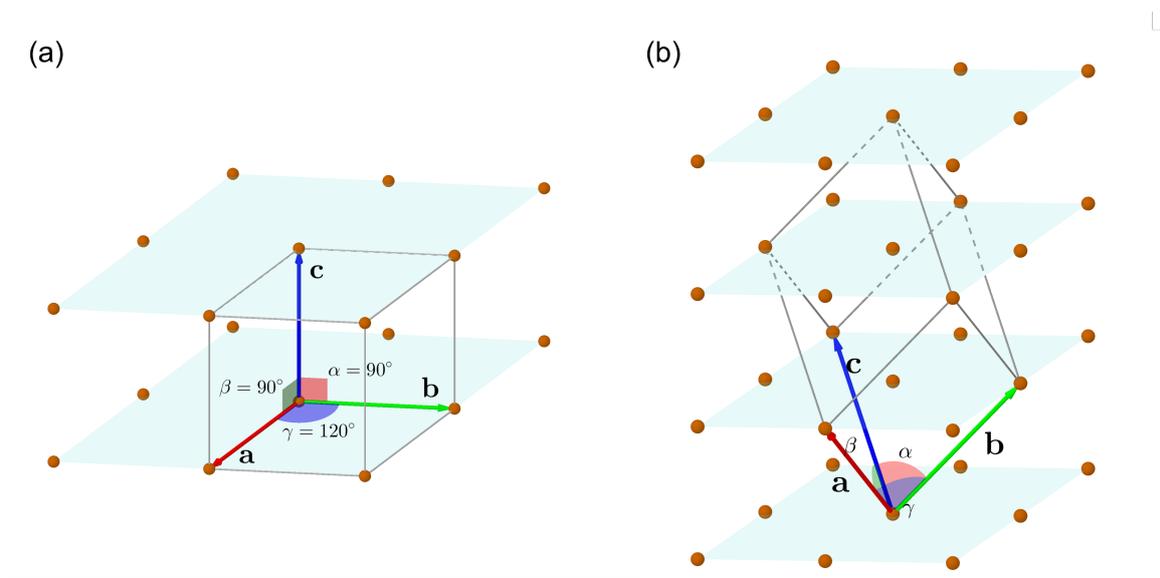


图 4.12: 三角晶系两种晶胞取法。

(7) 立方晶系 (Cubic)

此晶系存在四个三阶转动轴，晶胞参数取为

$$a = b = c, \alpha = \beta = \gamma = 90^\circ. \tag{4.46}$$

对应的晶体点群有  $T, O, T \cup IT = T_h, O \cup IO = O_h$ , 及  $T \cup I(O - T) = T_d$ 。

因此，32 个晶体点群依照对称元素的共性被分为七大晶系。

晶体点群和晶系是描述晶体的旋转对称性，即至少保持原点一点不变的对称性，因此没有考虑晶体本身的平移不变性。描述晶体的旋转及平移不变性的群是空间群。在此之前，先介绍描述点群和空间群常用的 Hermann-Mauguin (HM) 符号，也称为国际符号。人们在描述分子对称性时，倾向使用熊夫利符号，而描述晶体结构时，倾向使用 HM 符号，因为后者对平移对称性的描述更方便。

熊夫利符号使用点群的纯转动不变子群  $K$  与陪集代表元素来标记点群，因而有利于点群的完全分类，其第二类点群根据转动反射操作  $S_n = \sigma_h C_n$  来命名。而 HM 符号用不等价的轴或平面来标记晶体对称性，其第二类点群根据转动反演操作  $IC_n$  来命名，将  $n$  阶转轴和  $n$  阶转动反演轴分别记为

$$n \equiv C_n, \bar{n} \equiv IC_n. \tag{4.47}$$

由转动反演操作生成的第二类点群分别为

$$\bar{1} = \{E, I\} = S_2, \bar{2} = \{E, \sigma\} = S_1 = C_{1h},$$

$$\bar{3} = S_6, \bar{4} = S_4, \bar{6} = S_3 = C_{3h},$$

后面三种对应如图4.13所示。全部 32 个晶体点群的对应关系如下。

(1)  $S_2 \rightarrow \bar{1}, S_4 \rightarrow \bar{4}, S_6 \rightarrow \bar{3}$ 。

(2)  $C_1 \rightarrow 1, C_2 \rightarrow 2, C_3 \rightarrow 3, C_4 \rightarrow 4, C_6 \rightarrow 6$ 。

(3)  $D_2$  有三个不同类的二阶轴，记为  $D_2 \rightarrow 222$ ;  $D_3$  有一组同类的二阶轴与三阶主轴垂直，记为  $D_3 \rightarrow 32$ ;  $D_4$  有两组不同类的二阶轴与四阶主轴垂直，记为  $D_4 \rightarrow 422$ ;  $D_6$  有两组不同类的二阶轴与六次主轴垂直，记为  $D_6 \rightarrow 622$ 。

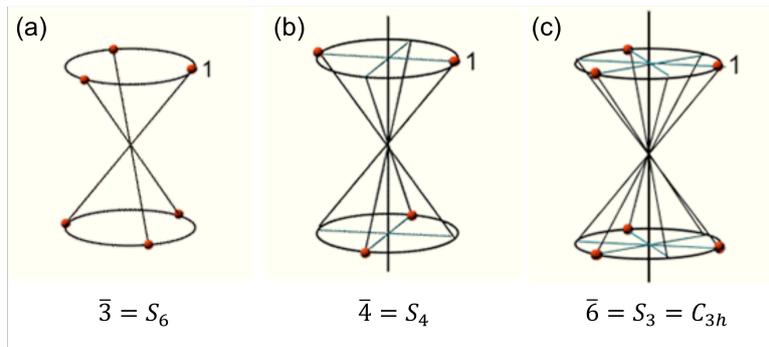


图 4.13: 熊夫利符号与国际符号的对应关系。

(4)  $T$  有二阶主轴, 且三阶轴都同类, 记为  $T \rightarrow 23$ ;  $O$  有四阶主轴, 且所有三阶轴、二阶轴都同类, 记为  $O \rightarrow 432$ 。

(5)  $C_{1h}$  有一个反射面, 记为  $C_{1h} \rightarrow m$ ;  $C_{2h}$  有与二阶主轴垂直的反射面, 记为  $C_{2h} \rightarrow 2/m$ ;  $C_{3h}$  有与三阶主轴垂直的反射面, 记为  $C_{3h} \rightarrow 3/m = \bar{6}$ ;  $C_{4h} \rightarrow 4/m$ ,  $C_{6h} \rightarrow 6/m$ 。

(6)  $C_{2v}$  有两个不同类的包含二阶主轴的反射面, 为  $2mm$ , 但习惯上记为  $C_{2v} \rightarrow mm2$ ;  $C_{3v}$  有一组同类的包含三阶主轴的反射面, 记为  $C_{3v} \rightarrow 3m$ ;  $C_{4v}$  有两组不同类的包含主轴的反射面, 记为  $C_{4v} \rightarrow 4mm$ ;  $C_{6v} \rightarrow 6mm$ 。

(7)  $D_{2h}$  有三个不同类的二阶轴, 且有与二阶轴都垂直的反射面, 记为  $2/m 2/m 2/m$ , 简记为  $D_{2h} \rightarrow mmm$ ;  $D_{3h}$  有三阶旋转反演主轴, 包含主轴的反射面, 及与主轴垂直的二阶轴, 记为  $D_{3h} \rightarrow \bar{6}m2$ ;  $D_{4h}$  有四阶主轴, 既有与主轴垂直的反射面, 也有两个不同类的过主轴的反射面, 记为  $D_{4h} \rightarrow 4/mmm$ ;  $D_{6h}$  有与六阶主轴垂直的反射面, 有两个不同类的二次轴, 并且存在垂直二次轴的反射面, 记为  $6/m 2/m 2/m$ , 简记为  $D_{6h} \rightarrow 6/mmm$ 。

(8)  $D_{2d}$  有四阶转动反演主轴, 垂直主轴的二次轴, 及包含主轴的反射面, 记为  $D_{2d} \rightarrow \bar{4}2m$ ;  $D_{3d}$  有三阶转动反演主轴, 垂直主轴的二阶轴, 及垂直二阶轴的反射面, 记为  $\bar{3}2/m$ , 简记为  $D_{3d} \rightarrow \bar{3}m$ 。

(9)  $T_h$  有与二阶主轴垂直的反射面, 且三阶旋转反演轴, 记为  $2/m \bar{3}$ , 简记为  $T_h \rightarrow m\bar{3}$ ;  $T_d$  有四阶旋转反演主轴, 一组三阶轴, 及包含主轴的反射面, 记为  $T_d \rightarrow \bar{4}3m$ 。

(10)  $O_h$  有与四阶主轴垂直的反射面, 一组三阶旋转反演轴, 一组二阶轴, 及与二阶轴垂直的反射面, 记为  $4/m \bar{3} 2/m$ , 简记为  $m\bar{3}m$ 。

七大晶系中 32 个晶体点群的熊夫利符号和 HM 符号汇总如表 4.3 所示。32 个晶体点群间存在子群关系, 如图 4.14 所示, 32 个点群自上而下按群阶从大到小排列, 相连直线代表子群关系。

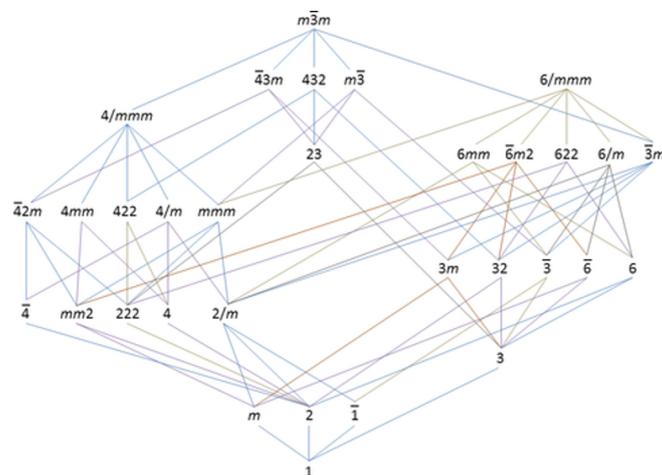


图 4.14: 32 个晶体点群间的子群关系。

晶系	熊夫利符号	Hermann-Mauguin 符号
三斜晶系	$S_2$	$\bar{1}$
	$C_1$	1
单斜晶系	$C_{2h}$	$2/m$
	$C_2$	2
	$C_{1h}$	$m$
正交晶系	$D_{2h}$	$mmm$
	$D_2$	222
	$C_{2v}$	$mm2$
四方晶系	$D_{4h}$	$4/mmm$
	$C_4$	4
	$S_4$	$\bar{4}$
	$D_4$	422
	$C_{4v}$	$4mm$
	$C_{4h}$	$4/m$
	$D_{2d}$	$\bar{4}2m$
三角晶系	$D_{3d}$	$\bar{3}m$
	$S_6$	$\bar{3}$
	$C_3$	3
	$C_{3v}$	$3m$
	$D_3$	32
六角晶系	$D_{6h}$	$6/mmm$
	$C_6$	6
	$C_{3h}$	$\bar{6}$
	$C_{6h}$	$6/m$
	$C_{6v}$	$6mm$
	$D_6$	622
	$D_{3h}$	$\bar{6}m2$
立方晶系	$O_h$	$m\bar{3}m$
	$T$	23
	$O$	432
	$T_h$	$m\bar{3}$
	$T_d$	$\bar{4}3m$

表 4.3: 晶体点群按晶系分类情况。

接下来, 我们将在晶体具有旋转对称性的基础上, 考虑晶体本身的平移不变性, 所有旋转与平移的联合变换也构成群, 称为空间群。

**§ 定义 4.6. 广义空间群** 已知  $R \in O(3)$  为转动元素,  $\mathbf{t}$  为任一矢量, 那么由所有转动平移算符  $\{R|\mathbf{t}\}$  组成的集合构成群, 称为广义空间群。

注. 转动平移算符对任意  $\mathbf{r} \in \mathbb{R}^3$  的作用定义为

$$\{R|\mathbf{t}\}\mathbf{r} = R\mathbf{r} + \mathbf{t}, \quad (4.48)$$

可以验证转动平移算符不是线性算符, 因为

$$\{R|\mathbf{t}\}(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) = R(\mathbf{r}_1 + \mathbf{r}_2) + \mathbf{t} \neq \{R|\mathbf{t}\}\mathbf{r}_1 + \{R|\mathbf{t}\}\mathbf{r}_2.$$

可以验证所有  $\{R|\mathbf{t}\}$  组成的集合构成群。

1. 封闭性: 对  $\forall R_1, R_2 \in O(3)$  及任意三维矢量  $\mathbf{t}_1, \mathbf{t}_2$ , 有

$$\begin{aligned} \{R_1|\mathbf{t}_1\}\{R_2|\mathbf{t}_2\}\mathbf{r} &= \{R_1|\mathbf{t}_1\}(R_2\mathbf{r} + \mathbf{t}_2) \\ &= R_1(R_2\mathbf{r} + \mathbf{t}_2) + \mathbf{t}_1 \\ &= \{R_1R_2|R_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1\}\mathbf{r}, \end{aligned}$$

即

$$\{R_1|\mathbf{t}_1\}\{R_2|\mathbf{t}_2\} = \{R_1R_2|R_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1\}, \quad (4.49)$$

满足封闭性。

2. 单位元: 恒等变换  $\{E|\mathbf{0}\}$  为单位元素。

3. 逆元素: 利用 (4.49) 式, 令等号右边单位元素  $\{E|\mathbf{0}\}$ , 得到  $R_2 = R_1^{-1}$ ,  $\mathbf{t}_2 = -R_1^{-1}\mathbf{t}_1$ , 即

$$\{R|\mathbf{t}\}^{-1} = \{R^{-1}|-R^{-1}\mathbf{t}\}. \quad (4.50)$$

4. 结合律: 易证

$$(\{R_1|\mathbf{t}_1\}\{R_2|\mathbf{t}_2\})\{R_3|\mathbf{t}_3\} = \{R_1R_2R_3|R_1R_2\mathbf{t}_3 + R_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1\} = \{R_1|\mathbf{t}_1\}(\{R_2|\mathbf{t}_2\}\{R_3|\mathbf{t}_3\}). \quad (4.51)$$

广义空间群有两个重要的子群, 分别为:

1.  $\mathbf{t} = \mathbf{0}$ ,  $\{R|\mathbf{0}\}$  构成的集合即  $O(3)$  为广义空间群的子群,  $O(3)$  群不是广义空间群的不变子群。

2.  $R = E$ ,  $\{E|\mathbf{t}\}$  构成的集合为广义空间群的子群, 称为平移群, 并且是广义空间群的不变子群。

以下证明平移群是广义空间群的不变子群。所有平移操作  $\{E|\mathbf{t}\}$  构成广义空间群的子群, 对广义空间群中的任意群元  $\{R'|\mathbf{t}'\}$ , 都有

$$\begin{aligned} \{R'|\mathbf{t}'\}\{E|\mathbf{t}\}\{R'|\mathbf{t}'\}^{-1} &= \{R'|\mathbf{t}'\}\{E|\mathbf{t}\}\{R'^{-1}|-R'^{-1}\mathbf{t}'\} \\ &= \{R'ER'^{-1}|R'E(-R'^{-1}\mathbf{t}') + R'\mathbf{t} + \mathbf{t}'\} \\ &= \{E|R'\mathbf{t}\}, \end{aligned} \quad (4.52)$$

即  $\{E|\mathbf{t}\}$  对于广义空间群的所有共轭元素都属于平移群，因此平移群是由完整类构成的子群，是广义空间群的不变子群。同时，平移群还是 Abel 群，因为三维矢量间的加法可交换。另一方面， $O(3)$  不是广义空间群的不变子群，因为  $\{R|\mathbf{0}\} \in O(3)$  的共轭元素为

$$\begin{aligned} \{R'|\mathbf{t}'\} \{R|\mathbf{0}\} \{R'|\mathbf{t}'\}^{-1} &= \{R'|\mathbf{t}'\} \{R|\mathbf{0}\} \{R'^{-1}|-R'^{-1}\mathbf{t}'\} \\ &= \{R'RR'^{-1}|R'R(-R'^{-1}\mathbf{t}') + R'\mathbf{0} + \mathbf{t}'\} \\ &= \{R'RR'^{-1}|-R'RR'^{-1}\mathbf{t}' + \mathbf{t}'\}, \end{aligned} \quad (4.53)$$

只有当  $R'RR'^{-1} = E$ ，即  $R = E$  时，该共轭元素才属于  $O(3)$ ，因此  $O(3)$  不包含广义空间群的完整类。

广义空间群不是晶体的对称变换群，因为晶体不具有任意的旋转不变性和平移不变性，保持晶体不变的转动平移算符构成广义空间群的一个子群。

**§ 定义 4.7. 晶体空间群** 广义空间群中，可以完全描述晶体对称性的转动平移算符组成的群称为晶体空间群，简称空间群。

晶体结构对转动平移变换的约束首先反映为以下两个性质：

**注 1.** 若平移操作  $\{E|\mathbf{t}\}$  是晶体的对称操作，则其平移矢量只能是格矢  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_n$ ， $\mathbf{R}_n = \sum_{i=1}^3 n_i \mathbf{a}_i$  为任意格矢。

**注 2.** 若  $R$  是晶体空间群某群元的转动算符， $\mathbf{R}_n$  是格矢，则  $R\mathbf{R}_n$  必然是格矢。

证明. 晶体空间群必然包含任意格矢平移算符  $\{E|\mathbf{R}_n\}$  的共轭元素，即取任意晶体空间群中的  $\{R|\mathbf{t}\}$ ，有  $\{R|\mathbf{t}\} \{E|\mathbf{R}_n\} \{R|\mathbf{t}\}^{-1}$  也属于晶体空间群，而由 (4.52) 式有

$$\{R|\mathbf{t}\} \{E|\mathbf{R}_n\} \{R|\mathbf{t}\}^{-1} = \{E|R\mathbf{R}_n\},$$

因此  $R\mathbf{R}_n$  也为晶格矢量。 □

以上性质标明纯平移操作  $\{E|\mathbf{t}\}$  中的平移矢量  $\mathbf{t}$  只能为格矢，而对于一般的转动平移操作  $\{R|\mathbf{t}\}$ ，其平移矢量满足以下要求。

**■ 定理 4.6.** 在晶体空间群  $G$  的群元  $\{R|\mathbf{t}\}$  中，平移部分只有两种可能性，即

1.  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m$ ;
2.  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m + (L/n)\mathbf{R}_0$ ，其中  $\mathbf{R}_m$  为晶格矢量， $\mathbf{R}_0$  为  $n$  次转轴方向的单位晶格矢量， $L$  为小于  $n$  的整数。

此定理的详细证明见徐婉棠，喀兴林《群论及其在固体物理中的应用》第六章 6.2 节，其中要注意的是晶体的转轴必定在格矢方向上， $n$  次转轴只能取  $n = 1, 2, 3, 4, 6$ 。第一种情况  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m$  是常见的转动联合整数格矢平移操作，是点群对称性加上晶格平移对称性的简单联合，这种对称性称为点式对称性 (symmorphic symmetry)；第二种情况  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m + (L/n)\mathbf{R}_0$  是转动联合分数格矢平移操作，称为非点式对称性 (nonsymmorphic symmetry)，包含螺旋转动 (skew rotation) 和滑移反射 (glide reflection) 两种。

螺旋转动的对称元素为螺旋轴，转动平移算符  $\{R|\mathbf{t}\}$  中的转动部分  $R$  为  $n$  次转动  $C_n$ ，平移部分为沿螺旋轴平移  $L/n$  个单位晶格矢量，这种螺旋轴记为  $n_L$  螺旋轴。以  $4_1$  螺旋轴为例，如图 4.15(a) 所示，沿螺

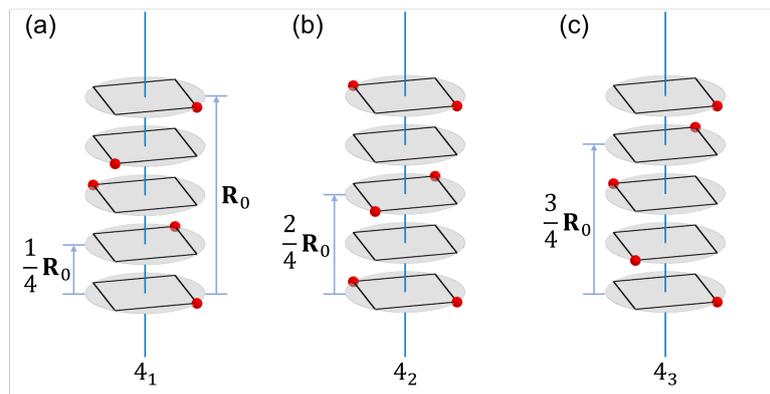


图 4.15: 四次螺旋转动示意图。

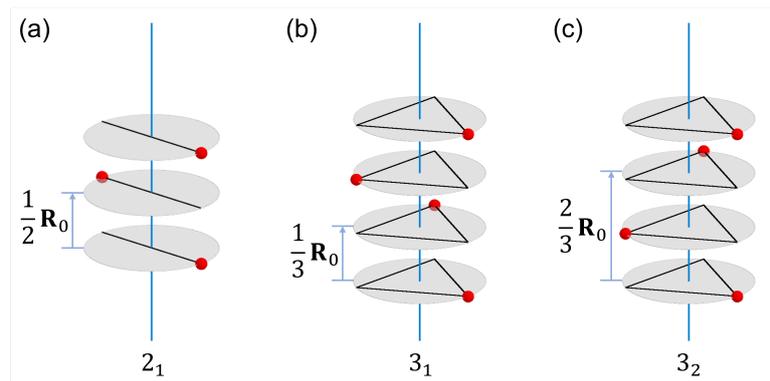


图 4.16: 二次、三次螺旋转动示意图。

旋轴方向单位晶格矢量为  $\mathbf{R}_0$ ，体系绕螺旋轴旋转  $\pi/2$  后，沿螺旋轴方向平移  $(1/4)\mathbf{R}_0$  后保持不变，因此转动平移元素为  $\{C_4|(1/4)\mathbf{R}_0\}$ 。同理  $4_2$  和  $4_3$  螺旋轴如图4.15(b) 和 (c) 所示。其余的二次、三次、六次螺旋轴见图4.16和图4.17，注意  $2_1, 4_2, 6_3$  的区别，即虽然都是平移  $(1/2)\mathbf{R}_0$ ，但旋转部分的不同反映不同的晶格对称性。

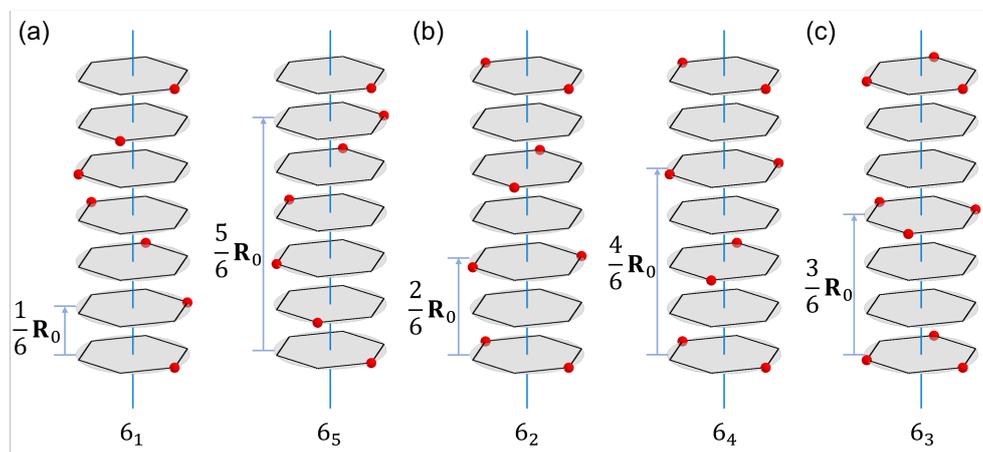


图 4.17: 六次螺旋转动示意图。

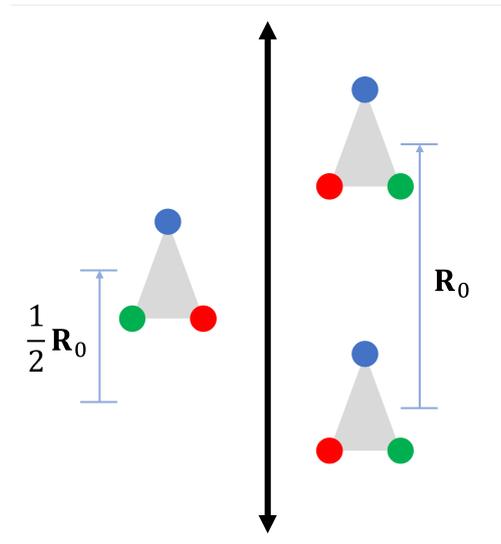


图 4.18: 滑移反射示意图。

滑移反射的对称元素是滑移面，如图4.18所示，转动平移算符中的转动部分  $R$  为反射操作  $\sigma = IC_2$ ，平移部分为沿反射面内方向平移  $1/2$  个单位晶格矢量，用特定字母代表平移方向以描写滑移面，如沿基本矢量  $\mathbf{a}_1$  平移  $(1/2)\mathbf{a}_1$  的记为滑移面  $a$  等。

因此可对晶体空间群做简单分类。若空间群的所有转动平移算符  $\{R|\mathbf{t}\}$  中的平移部分都是晶格矢量  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m$ ，则该空间群称为点式空间群；若空间群存在转动平移算符  $\{R|\mathbf{t}\}$  中的平移部分为  $\mathbf{t} = \mathbf{R}_m + (L/n)\mathbf{R}_0$ ，则该空间群称为非点式空间群。

### 晶体空间群的结构

分析完空间群群元的性质后，我们分析晶体空间群的结构。上文已证明平移群是广义空间群的不变子群，取平移矢量为所有晶格矢量  $\mathbf{R}_n$ ，所有平移元素  $\{E|\mathbf{R}_n\}$  构成平移群的子群，称为晶体平移群  $T$ ，可以类似证明晶体平移群  $T$  也是晶体空间群  $G$  的不变子群。因为只关注晶体对称性，下文一般把晶体空间群和晶体平移群简称为空间群和平移群。

平移群  $T$  由平移矢量  $\mathbf{t}$  为晶格矢量  $\mathbf{R}_n$  的平移元素  $\{E|\mathbf{t}\}$  组成，即为

$$T = \{\{E|\mathbf{t}\} | \mathbf{t} = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3, n_i \in \mathbb{Z}\}. \quad (4.54)$$

平移群是 Abel 群，任意的群元都能表示为

$$\{E|\mathbf{t}\} = \{E|\mathbf{a}_1\}^{n_1} \{E|\mathbf{a}_2\}^{n_2} \{E|\mathbf{a}_3\}^{n_3}. \quad (4.55)$$

显然，三个平移晶格基矢的平移操作  $\{E|\mathbf{a}_i\}$  都能生成一个平移群的子群  $T_i = \{\{E|\mathbf{a}_i\}^n | n \in \mathbb{Z}\}$ ，而 Abel 群的子群必为不变子群，且三个平移子群仅有单位元  $\{E|\mathbf{0}\} = \{E|\mathbf{a}_i\}^0$  作为公共元素，因此平移群  $T$  是直积群

$$T = T_1 \otimes T_2 \otimes T_3. \quad (4.56)$$

因此平移群是一个分立无限的直积群，只有 1 维不等价不可约表示，具有简单的结构。相对而言，空间群  $G$  的结构更复杂，但是平移群  $T$  是其不变子群，可以使用平移群的部分性质来描写空间群  $G$ 。平移群不包含旋转元素，因此空间群对平移群的商群  $G/T$  包含空间群的旋转操作的信息。在讨论该商群前，先定义空间群的点群。

§ 定义 4.8. 空间群的点群 当空间群  $G$  所有群元的平移部分为零时, 算符  $\{R|\mathbf{0}\}$  的集合构成的群就称为空间群  $G$  的点群  $G_0$ 。如果  $G_0$  是空间群  $G$  的子群, 那么  $G$  称为点式空间群 (*symmorphic group*), 如不是,  $G$  称为非点式空间群 (*nonsymmorphic group*)。

算符  $\{R|\mathbf{0}\}$  的集合构成群是显然的, 可以从空间群  $G$  构成群的条件 (4.49)-(4.51) 出发, 将平移部分都取为零, 即可验证  $G_0$  构成群。注意此处对点式空间群和非点式空间群的分类与前文依据平移部分形式的分类是一致的。因为对于旋转平移元素  $\{R|\mathbf{R}_m + (L/n)\mathbf{R}_0\}$ , 只有旋转操作和平移操作的联合操作保持晶体不变, 将平移部分取为零, 则  $\{R|\mathbf{0}\}$  并不保持晶体不变, 因此这些  $G_0$  的群元不属于空间群  $G$ , 因此  $G_0$  不是  $G$  的子群。以滑移面为例, 如图 4.18 所示, 旋转平移元素为  $\{\sigma|(1/2)\mathbf{R}_0\}$ , 取平移部分为零,  $\{\sigma|\mathbf{0}\}$  并非晶体的对称操作。因此两种定义点式空间群和非点式空间群的方式是等价的。

虽然空间群  $G$  的点群  $G_0$  不一定是  $G$  的子群, 但它描述了空间群的所有转动信息, 因此与空间群对平移群的商群  $G/T$  具有以下关系。

■ 定理 4.7. 空间群  $G$  对平移群  $T$  的商群  $G/T$  与空间群的点群  $G_0$  同构。

证明. 已知平移群  $T$  是空间群  $G$  的不变子群, 则商群  $G/T$  为不变子群  $T\{E|\mathbf{t}\}$  和陪集  $T\{R_i|\mathbf{t}_i\}$  构成的集合, 其中  $\{R_i|\mathbf{t}_i\}$  为陪集代表元 ( $i = 1, \dots, n$ ), 而空间群的点群  $G_0$  为  $\{E|\mathbf{0}\}, \{R_1|\mathbf{0}\}, \dots, \{R_n|\mathbf{0}\}$ , 并且  $G_0$  中的每一个群元  $\{R_i|\mathbf{0}\}$  对应  $G/T$  中的一个陪集  $T\{R_i|\mathbf{t}_i\}$ , 因为该陪集中任意转动平移算符的转动部分都是  $R_i$ , 反之亦然。所以商群  $G/T$  与空间群的点群  $G_0$  之间存在一一对应关系, 即

$$\begin{array}{ccc} G/T & & G_0 \\ T\{E|\mathbf{0}\} & \longleftrightarrow & \{E|\mathbf{0}\} \\ T\{R_1|\mathbf{t}_1\} & \longleftrightarrow & \{R_1|\mathbf{0}\} \\ \vdots & & \vdots \\ T\{R_n|\mathbf{t}_n\} & \longleftrightarrow & \{R_n|\mathbf{0}\} \end{array}$$

只需证明这种一一对应关系保持群乘法关系即可。考虑商群  $G/T$  中任意两个陪集的乘法, 为

$$\begin{aligned} T\{R_i|\mathbf{t}_i\}T\{R_j|\mathbf{t}_j\} &= TT\{R_i|\mathbf{t}_i\}\{R_j|\mathbf{t}_j\} \\ &= T\{R_iR_j|R_i\mathbf{t}_j + \mathbf{t}_i\} \\ &= T\{R_iR_j|\mathbf{t}'\}, \end{aligned} \quad (4.57)$$

因此有

$$\begin{array}{ccc} G/T : T\{R_i|\mathbf{t}_i\}T\{R_j|\mathbf{t}_j\} & = & T\{R_iR_j|\mathbf{t}'\} \\ \downarrow & & \downarrow \\ G_0 : \{R_i|\mathbf{0}\}\{R_j|\mathbf{0}\} & = & \{R_iR_j|\mathbf{0}\} \end{array}$$

即该一一映射保持群乘法关系不变, 因此为同构映射,  $G/T \cong G_0$ 。□

特别地, 若  $G$  为点式空间群  $G_{sym}$ , 即任意旋转平移算符都能写为  $\{R|\mathbf{R}_m\}$  即平移矢量为格矢, 则以上证明过程的陪集代表元均可取为  $\{R_i|\mathbf{0}\}$ , 任意  $\{R|\mathbf{R}_m\}$  都能表示为

$$\{R|\mathbf{R}_m\} = \{E|\mathbf{R}_m\}\{R|\mathbf{0}\}, \{E|\mathbf{R}_m\} \in T, \{R|\mathbf{0}\} \in G_0, \quad (4.58)$$

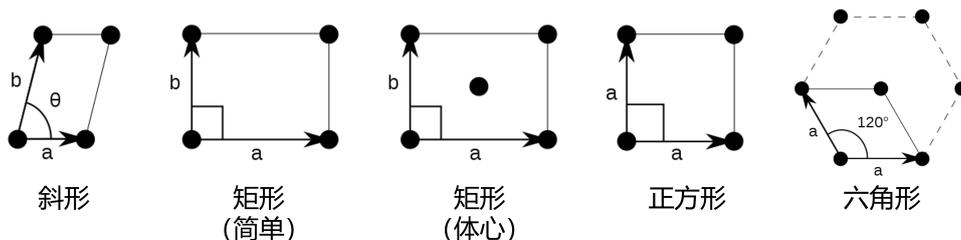


图 4.19: 5 种二维布拉伐格子。

因此点式空间群  $G_{sym}$  的任意群元由点群  $G_0$  和平移群  $T$  各提供一个群元给出，且仅有恒等变换为两个群的公共元素，因此点式空间群  $G_{sym}$  是平移群  $T$  和其点群  $G_0$  的半直积

$$G_{sym} = T \rtimes G_0. \quad (4.59)$$

$G_{sym}$  不具有直积群的结构，因为其点群  $G_0$  并非其不变子群。

上述定理指出空间群  $G$  的结构由平移群  $T$  和空间群的点群  $G_0$  共同决定。 $G_0$  描述晶体的旋转对称性，因此只能为 32 个晶体点群，在此基础上再确定晶体平移群的所有可能后，即可得到全部的晶体空间群  $G$ 。每一种晶体平移群称为一种布拉伐 (Bravais) 格子。二维体系 (两个晶格基矢) 的布拉伐格子一共有 5 种，分别为斜形、矩形 (两种)、正方形、六角形，如图 4.19 所示。

对于三维体系，按照最小重复单元的形状可以将不同的格子分为三斜、单斜、正交、四方、菱方、六方、正方这 7 种晶格系统。注意 7 种晶格系统与 7 种晶系的区别，7 种晶系是按照旋转元素的共性进行分类，而 7 晶格种晶格系统是按照最小重复单元的形状进行分类，因此 7 种晶系中六角晶系属于六方晶体系统，但是三角晶系按照重复单元的两种取法分属为菱方和六方两种晶格系统。在某个晶格系统的六面体顶点放置原子，则形成一种晶体；若在此六面体的基础上在面心、体心等高对称点再放置原子，晶胞的点群对称性不变，但是会形成另一种晶体。为了描述这些对称性，我们在 7 种晶格系统的体心、面心等高对称点添加与顶点相同的重复单元 (原子或者原子的集合)，使晶格发生变化，最终产生 14 种三维布拉伐格子，如图 4.20 所示。

修饰前的 7 种晶体系统称为简单晶格，以  $P$  表示。特别地，为了区分菱方和六方晶格系统的简单晶格，以  $R$  表示菱方晶格。若在六面体某一组平行面中心加一个修饰，则称为底心晶格，依照面心所在的平面不同，以  $A, B, C$  表示面心晶格 (如在  $\mathbf{a}_2$  和  $\mathbf{a}_3$  张成平面的中心加修饰，记为  $A$  面心)。若在六面体体心加一个修饰，称为体心晶格，以  $I$  表示。若在六面体所有表面中心都加上修饰，则称为面心晶格，以  $F$  表示。具体的修饰过程见李新征《群论及其在凝聚态物理中的应用》第三章 3.4 节。

有了 32 种晶体点群和 14 种布拉伐格子后，可将对称性相容的部分组合，形成空间群，空间群使用一个大写字母表示布拉伐格子，使用国际符号表示晶体点群。以立方晶系为例，它允许简单、体心、面心三种格子，也允许  $T, O, T_h, T_d, O_h$  五种点群。以  $O$  群为例，配合简单、体心、面心三种格子，得到的群元  $\{R|t\}$  的转动部分都是相同的  $R \in O$ ，但是平移部分皆不相同，如图 4.21 所示，因此给出 3 种空间群，分别记为  $P432, I432$ ，和  $F432$ 。以此类推，对立方晶系，只考虑这种简单组合，给出  $3 \times 5 = 15$  种空间群。现在考虑 7 种晶系下相容的布拉伐格子和点群，如表 4.4 所示，则一共给出 66 种空间群。

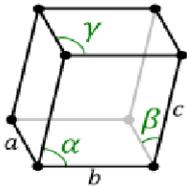
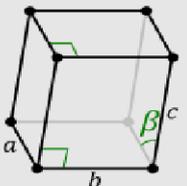
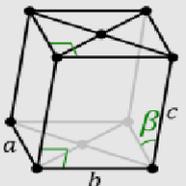
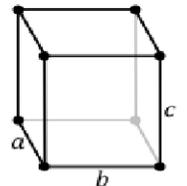
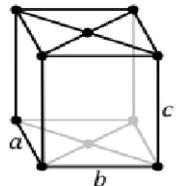
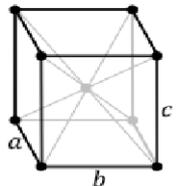
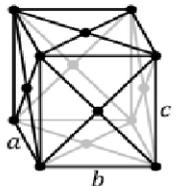
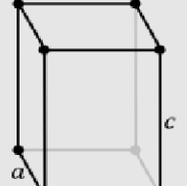
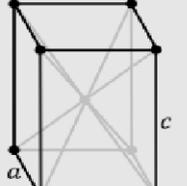
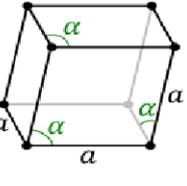
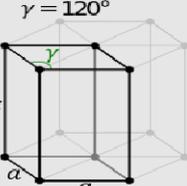
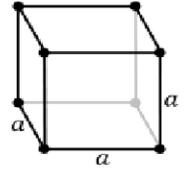
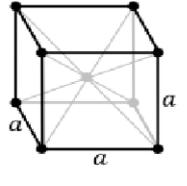
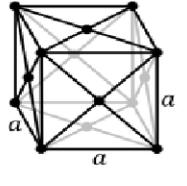
晶格系统	14种布拉伐格子			
	简单 (P)	底心 (A, B, C)	体心 (I)	面心 (F)
三斜 Triclinic				
单斜 Monoclinic				
正交 Orthorhombic				
四方 Tetragonal				
菱方 Rhombohedral				
六方 Hexagonal				
正方 Cubic				

图 4.20: 14 种三维布拉伐格子。

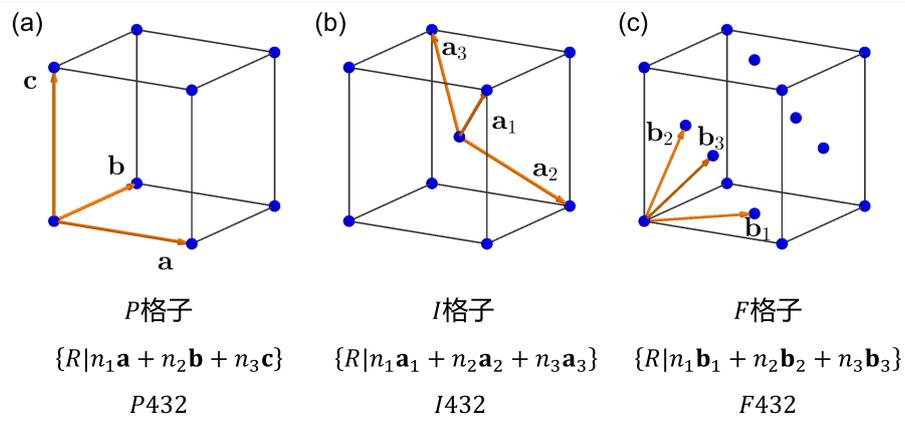


图 4.21: *O* 群配合三种布拉伐格子简单形成的空间群及其群元。

晶系	布拉伐格子数	点群数	乘积
立方	3	5	15
四方	2	7	14
正交	4	3	12
单斜	2	3	6
三斜	1	2	2
三角	2 (棱方 + 六方)	5	10
六角	1	7	7
总数	14	32	66

表 4.4: 布拉伐格子和点群的简单组合数。

晶系	点群	额外空间群
正交	$C_{2v}(mm2)$	$Amm2$
四方	$D_{2d}(\bar{4}2m)$	$P\bar{4}m2, I\bar{4}m2$
三角	$D_3(32)$	$P312$
	$C_{3v}(3m)$	$P31m$
	$D_{3d}(\bar{3}m)$	$P\bar{3}1m$
六角	$D_{3h}(\bar{6}m2)$	$P\bar{6}2m$

表 4.5: 布拉伐格子与点群不同的配合情况得出的额外空间群。

显然, 这种方式给出的空间群都是点式空间群, 因为构造的过程中的平移矢量都是整数倍的平移周期。然而这种构造方式并没有给出所有的点式空间群, 因为同一套点群和布拉伐格子可以有不同的组合方式。以正交晶系的底心格子为例, 在分类布拉伐格子时, 把任意面的中心认为是同一种格子, 但是当与  $C_{2v}(mm2)$  结合时, 具有底面中心 ( $C$  底心) 和侧面中心 ( $A$  底心) 的两种底心格子将给出不同的空间群, 记为  $Cmm2$  和  $Amm2$ 。类似的情况还有四方晶系的简单格子, 与  $D_{2d}(\bar{4}2m)$  结合时, 与四阶转动反演轴 ( $z$  方向) 垂直的二阶轴可以有通过侧面中心 ( $x$  方向) 和通过对棱中心 (平分  $xy$  轴) 两种情况, 二阶轴为  $x$  方向的空间群记为  $P\bar{4}2m$ , 包含在 66 种空间群中, 而二阶轴平分  $xy$  轴的空间群是另外的情况, 记为  $P\bar{4}m2$ 。以此类推, 考虑不同的配合情况将额外给出 7 种点式空间群, 如表 4.5 所示, 因此一共有 73 种点式空间群。

在得到所有点式空间群后, 我们可将点式空间群  $G_{sym}$  中的点式对称元素替换为相应的非点式对称元素, 旋转平移算符  $\{R|\mathbf{R}_m\}$  替换为  $\{R|\mathbf{R}_m + (L/n)\mathbf{R}_0\}$ , 若此时仍构成群, 则得到非点式空间群  $G_{nonsym}$ , 这样得到的非点式空间群  $G_{nonsym}$  与相应的点式空间群  $G_{sym}$  具有相同的点群  $G_0$ , 但是  $G_0$  并非  $G_{nonsym}$  的子群。以单斜晶系简单格子配合  $C_2(2)$  点群为例, 从点式空间群  $P2$  出发, 将二阶转轴  $2$  替换为二阶螺旋轴  $2_1$ , 相应的转动平移算符从  $\{C_2|\mathbf{0}\}$  替换为  $\{C_2|(1/2)\mathbf{R}_0\}$ , 两次螺旋转动为

$$\{C_2|(1/2)\mathbf{R}_0\}^2 = \{E|(1/2)C_2\mathbf{R}_0 + (1/2)\mathbf{R}_0\} = \{E|\mathbf{R}_0\} \in T, \quad (4.60)$$

其中利用到  $\mathbf{R}_0$  是螺旋轴方向的单位晶格矢量, 即  $C_2\mathbf{R}_0 = \mathbf{R}_0$ 。容易验证这个集合构成群, 且可以按平移群  $T$  作子群陪集分解为  $\{\{E|\mathbf{0}\}T, \{C_2|(1/2)\mathbf{R}_0\}T\}$ , 即以非点式部分可以标记该空间群, 在国际符号中则以二阶螺旋轴  $2_1$  标记对称元素, 因此该非点式空间群记为  $P2_1$ 。

除了螺旋轴外, 另一种非点式操作为滑移反射操作, 需要将点式空间群中的反射面替换为滑移反射面, 这种情况的描述更为复杂, 因为滑移反射面的平移方向可以有多个选择。以正交晶系配合  $D_{2h}(mmm)$  点群为例, 从四个点式空间群  $Pmmm$ ,  $Cmmm$ ,  $Immm$  和  $Fmmm$  出发, 将里面的一类或者多类反射面替换为滑移反射面, 可以得到 24 种非点式空间群, 如表 4.6 所示。这些记号的含义如下:

1.  $a, b, c$  表示平移矢量分别为  $(1/2)$  倍的  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$ 。如  $Pmma$  表示存在一个滑移反射面, 法线为  $z$  轴, 平移矢量为  $(1/2)\mathbf{a}_1$ , 相应的转动平移算符为  $a = \{\sigma_z|(1/2)\mathbf{a}_1\}$ ;
2.  $n$  表示平移矢量为六面体  $(1/2)$  倍的面面对角线。如  $Pmnn$  表示存在一个滑移反射面, 法线为  $z$  轴, 平移矢量为  $(1/2)(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)$ , 相应的转动平移算符为  $n = \{\sigma_z|(1/2)(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)\}$ ;
3.  $d$  表示平移矢量为六面体  $(1/4)$  倍的面面对角线。如  $Fddd$  存在三类滑移反射面, 对应的转动平移算符分别为  $\{\sigma_x|(1/4)(\mathbf{a}_2 + \mathbf{a}_3)\}$ ,  $\{\sigma_y|(1/4)(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_3)\}$ , 及  $\{\sigma_z|(1/4)(\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)\}$ ;

空间群序号	空间群
47 – 62	$Pmmm, Pnnn, Pccm, Pban, Pmma, Pnna, Pmna, Pcca$ $Pbam, Pccn, Pbcm, Pnnm, Pmmn, Pbcn, Pbca, Pnma$
63 – 68	$Cmcm, Cmce, Cmmm, Cccm, Cmme, Ccce$
69 – 70	$Fmmm, Fddd$
71 – 74	$Immm, Ibam, Ibca, Imma$

表 4.6: 正交晶系的空间群。

4.  $e$  表示同时存在两个正交的平移矢量 (即该滑移反射面可以被记为  $a$  或  $b$ ,  $b$  或  $c$ ,  $c$  或  $a$  时)。如  $Cmme$  同时存在两个平移矢量正交的滑移反射操作  $a = \{\sigma_z | (1/2) \mathbf{a}_1\}$  和  $b = \{\sigma_z | (1/2) \mathbf{a}_2\}$ 。

以此类推, 对 73 种点式空间群做相似的替换, 可以得到 157 种非点式空间群。因此, 从 14 种布拉伐格子和 32 种晶格点群出发, 可以得到 230 种晶体空间群。我们可以使用 3 种方式来表示任意一个空间群, 分别是空间群序号, 国际符号, 及熊夫利符号, 如

序号	国际符号	熊夫利符号
17	$P222_1$	$D_2^2$

其中熊夫利符号表示空间群  $P222_1$  的点群是  $D_2(222)$ , 上标的 2 表示是由  $D_2$  生成的第 2 个空间群。实际上空间群序号和熊夫利符号都依赖固定排序, 只有国际符号能直观体现空间群的对称性。230 种空间群的序号、国际符号、对称元素、生成元可以在 Bilbao Crystallographic Server (<https://www.cryst.ehu.es/>) 查阅得到。以下给出几个空间群的例子。

**例 4.1.** 132 号空间群  $P4_2/mcm$ 。

该空间群的点群为  $4/mmm(D_{4h})$ , 包含螺旋轴  $4_2$ , 螺旋转动操作为  $\{C_{4z} | (2/4) \mathbf{a}_3\}$ ; 包含滑移面  $c$ , 滑移反射操作为  $\{\sigma_x | (1/2) \mathbf{a}_3\}$ 。

**例 4.2.**  $NaCl$  的空间群为 225 号空间群  $Fm\bar{3}m$ 。

该空间群的点群为  $m\bar{3}m(O_h)$ , 而  $O_h = O \cup IO = O \otimes \{E, I\}$ , 又因为该点群为点式空间群, 于是空间群分为  $T_n\{O|0\}$  和  $T_n\{IO|0\}$  两部分, 此处为免混淆以  $T_n$  特指晶体平移群。

**例 4.3.** 金刚石的空间群为 227 号空间群  $Fd\bar{3}m$ 。

该空间群的点群为  $m\bar{3}m(O_h)$ , 且包含滑移反射面  $d = \{\sigma_z | (1/4) (\mathbf{a}_1 + \mathbf{a}_2)\}$ , 空间群可以分为四部分, 分别为

$$T_n\{T|0\}, T_n\{I(O-T)|0\}, T_n\{IT|\tau_{1/4}\}, T_n\{(O-T)|\tau_{1/4}\},$$

其中  $\tau_{1/4}$  为任意的  $(1/4)$  倍面对角线方向矢量。

## 5 群论与量子力学

### 5.1 哈密顿算符群

本章关注如何将群论工具应用至物理系统中，包括如何描述物理系统和本征态的对称性，以及因扰动导致对称性降低后，本征态之间的跃迁规律等，实现群论语言与物理语言的对应。这里主要关心群论在量子力学中的应用，其中哈密顿量包含系统的全部信息，因此体系满足的对称性会反映在哈密顿量上。哈密顿量是希尔伯特空间的算符，在坐标表象下依赖于坐标，记为  $\hat{H}(\mathbf{r})$ 。注意这里主要关注单粒子哈密顿量，多粒子哈密顿量的对称性需要用置换群描述，这里不做详细介绍。如果体系在坐标空间的变换  $g: \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  下是不变的，则哈密顿量算符需要满足以下定理。

■ **定理 5.1.** 如果  $g$  是保持哈密顿量  $\hat{H}(\mathbf{r})$  不变的坐标空间的变换，那么它所对应希尔伯特空间的函数变换算符  $\hat{P}_g$  与  $\hat{H}(\mathbf{r})$  互易。

证明. 假设定态薛定谔方程为

$$\hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = E\psi(\mathbf{r}), \quad (5.1)$$

$g: \mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}'$  为坐标空间的变换， $g$  对应的希尔伯特空间的函数变换算符  $\hat{P}_g$  作用在波函数上，满足

$$\hat{P}_g\psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r}). \quad (5.2)$$

将  $\hat{P}_g$  作用于 (5.1) 式，等号左边为

$$\hat{P}_g\hat{H}(\mathbf{r})\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}_g\hat{H}(\mathbf{r})\hat{P}_g^{-1}\hat{P}_g\psi(\mathbf{r}) = \hat{P}_g\hat{H}(\mathbf{r})\hat{P}_g^{-1}\psi(g^{-1}\mathbf{r}), \quad (5.3)$$

等号右边为

$$\hat{P}_gE\psi(\mathbf{r}) = E\psi(g^{-1}\mathbf{r}), \quad (5.4)$$

又因为

$$\hat{H}(g^{-1}\mathbf{r})\psi(g^{-1}\mathbf{r}) = E\psi(g^{-1}\mathbf{r}), \quad (5.5)$$

于是得到哈密顿量算符的变换式

$$\hat{P}_g\hat{H}(\mathbf{r})\hat{P}_g^{-1} = \hat{H}(g^{-1}\mathbf{r}). \quad (5.6)$$

若体系在坐标空间的变换下不变，即  $\hat{H}(g\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r})$ ，则

$$\hat{P}_g\hat{H}(\mathbf{r})\hat{P}_g^{-1} = \hat{H}(\mathbf{r}) \Rightarrow [\hat{P}_g, \hat{H}(\mathbf{r})] = 0. \quad (5.7)$$

□

所有保持体系不变的坐标变换  $g$  构成一个群，该群描述体系的对称性，称为哈密顿量算符的群。

§ **定义 5.1. 哈密顿算符的群** 所有保持哈密顿量  $\hat{H}(\mathbf{r})$  不变的变换  $g$  的集合形成的群，称为哈密顿算符的群，记为：

$$G_H = \{g | \hat{H}(g\mathbf{r}) = \hat{H}(\mathbf{r})\}.$$

相应的，在希尔伯特空间，所有保持  $\hat{H}(\mathbf{r})$  不变的变换  $g$  对应的函数变换算符  $\hat{P}_g$  也构成群。

§ 定义 5.2. 哈密顿算符群 由哈密顿算符的群中群元对应的函数变换算符形成的群，称为哈密顿算符群，或薛定谔方程群，记为：

$$P_{G_H} = \{ \hat{P}_g | g \in G_H \}.$$

哈密顿量算符的群  $G_H$  是变换操作  $g$  的集合，是变换群；哈密顿算符群  $P_{G_H}$  是算符  $\hat{P}_g$  的集合，是算符群。显然  $g$  与  $\hat{P}_g$  具有一一对应关系，并且该对应关系保持乘法关系，即  $\forall g, f \in G_H$

$$\hat{P}_g \hat{P}_f = \hat{P}_{gf}, \quad \hat{P}_{g^{-1}} = \hat{P}_g^{-1}. \quad (5.8)$$

因此这两个群是同构的  $G_H \cong P_{G_H}$ 。

在量子力学中，群的表示理论具有广泛应用。二者间的联系反映在基函数上，在群表示理论中，基函数承载群表示，而在量子力学中，基函数是哈密顿量的本征态，二者具有以下关系。

■ 定理 5.2. 哈密顿量算符  $\hat{H}(\mathbf{r})$  的具有相同本征能量的本征函数，构成哈密顿算符群  $P_{G_H}$  的群表示的基函数。

该定理描述哈密顿量的  $\ell$  重简并能级对应的本征波函数  $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$ ，张成一个  $\ell$  维线性空间，此  $\ell$  维线性空间可以作为哈密顿量算符群  $P_{G_H}$  的表示空间，以本征态  $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$  为基得到  $P_{G_H}$  的一个表示  $\{A(g)\}$ 。

证明. 取一个  $\ell$  重简并的能级  $E_n$ ，对应的本征函数  $\psi_i(\mathbf{r})$  ( $i = 1, \dots, \ell$ ) 形成线性空间  $W^H$ 。对  $\forall \hat{P}_g \in P_{G_H}$ ， $[\hat{P}_g, \hat{H}(\mathbf{r})] = 0$ ，因此

$$\hat{H}(\mathbf{r}) [\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r})] = \hat{P}_g \hat{H}(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) = E_n [\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r})], \quad (5.9)$$

即  $\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r})$  也是哈密顿量能量为  $E_n$  的本征函数  $\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r}) \in W^H$ 。 $\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r})$  作为线性空间  $W^H$  中的矢量，可用基矢量展开为

$$\hat{P}_g \psi_i(\mathbf{r}) = \sum_{j=1}^{\ell} A_{ji}(g) \psi_j(\mathbf{r}), \quad (5.10)$$

即  $A(g)$  是  $P_{G_H}$  以本征波函数  $\{\psi_i(\mathbf{r})\}$  为基的一个群表示。□

注意此处  $\hat{H}(\mathbf{r})$  的  $n$  重简并态虽然对应于  $P_{G_H}$  的一个  $n$  维表示，但是该表示不一定是不可约表示。但是相反情况是成立的，表现为以下定理。

■ 定理 5.3. 构成哈密顿算符群的不可约表示的本征函数必属于同一能级。

此定理指出哈密顿量相同能级的本征态至少承载 (furnish) 一个不可约表示，而不能是半个不可约表示。若简并态承载多于一个不可约表示，则简并能级为偶然简并。

证明. 采用反证法证明，若  $\hat{H}(\mathbf{r})$  的  $\ell$  个本征函数  $\psi_i(\mathbf{r})$  构成  $P_{G_H}$  的第  $\alpha$  个不可约表示  $A^\alpha$ ，假设前  $\ell - 1$  个本征函数的能量为  $E$ ，最后一个本征函数的能量为  $E'$ ，且  $E \neq E'$ ，即

$$\hat{H}(\mathbf{r}) \psi_\ell(\mathbf{r}) = E' \psi_\ell(\mathbf{r}). \quad (5.11)$$

以  $\hat{P}_g \in P_{G_H}$  作用, 等号左边为

$$\begin{aligned} \hat{P}_g \hat{H}(\mathbf{r}) \psi_\ell(\mathbf{r}) &= \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{P}_g \psi_\ell(\mathbf{r}) \\ &= \hat{H}(\mathbf{r}) \sum_{j=1}^{\ell} A_{j\ell}^\alpha(g) \psi_j(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{j=1}^{\ell-1} A_{j\ell}^\alpha(g) E \psi_j(\mathbf{r}) + A_{\ell\ell}^\alpha(g) E' \psi_\ell(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5.12)$$

等号右边为

$$\begin{aligned} \hat{P}_g E' \psi_\ell(\mathbf{r}) &= E' \sum_{j=1}^{\ell} A_{j\ell}^\alpha(g) \psi_j(\mathbf{r}) \\ &= \sum_{j=1}^{\ell-1} A_{j\ell}^\alpha(g) E' \psi_j(\mathbf{r}) + A_{\ell\ell}^\alpha(g) E' \psi_\ell(\mathbf{r}), \end{aligned} \quad (5.13)$$

对比  $\psi_j(\mathbf{r})$  前的系数, 得到  $E' = E$ , 与假设矛盾。因此承载  $P_{G_H}$  同一个不可约表示的本征函数的能量都相等。

也可以使用舒尔引理二证明。因为  $\hat{H}(\mathbf{r}) \hat{P}_g = \hat{P}_g \hat{H}(\mathbf{r})$ , 所以等号两边以  $\psi_i(\mathbf{r})$  为基函数写出的矩阵也相等,  $\hat{P}_g$  的矩阵表示即为不可约表示矩阵  $A^\alpha(g)$ , 假设  $\psi_i(\mathbf{r})$  的本征能量为  $E_i$ , 即

$$\hat{H}(\mathbf{r}) \psi_i(\mathbf{r}) = E_i \psi_i(\mathbf{r}), \quad (5.14)$$

则  $\hat{H}(\mathbf{r})$  的矩阵为对角矩阵  $M$ , 矩阵元为  $M_{ij} = E_i \delta_{ij}$ 。  $\hat{H}(\mathbf{r}) \hat{P}_g = \hat{P}_g \hat{H}(\mathbf{r})$  的矩阵形式为  $MA^\alpha(g) = A^\alpha(g)M$ , 对任意  $g \in G_H$  (或任意  $\hat{P}_g \in P_{G_H}$ ) 成立,  $A^\alpha(g)$  为  $\ell$  维不可约表示, 因此舒尔引理二指出  $M = \lambda I_\ell$ , 对比可得  $E_i = \lambda$ , 即承载  $P_{G_H}$  同一个不可约表示的本征函数的能量都相等。  $\square$

注. 若  $A(g)$  为可约表示, 则  $M$  具有分块对角形式

$$M = \sum_i \oplus \lambda_i I_{n_i}, \quad \sum_i n_i = \dim M, \quad (5.15)$$

此处不同的本征能量  $\lambda_i$  可能相等, 相等时对应偶然简并情况。

因此, 我们有从量子力学到群论的对应关系如下:

$$\begin{array}{ccccc} \text{哈密顿量} & \longrightarrow & \text{能级简并} & \longrightarrow & \text{波函数} \\ \updownarrow & & \updownarrow & & \updownarrow \\ \text{哈密顿算符群} & \longrightarrow & \text{群表示} & \longrightarrow & \text{基函数} \end{array}$$

由此可知哈密顿量的对称性越高, 能级简并度 (不可约表示维度) 将会越高。加入不破坏哈密顿量对称性的微扰项后, 不同的能级可能发生偶然简并 (形成可约表示), 但同一不可约表示的简并态并不会发生劈裂。

**例 5.1.** 哈密顿量具有  $T$  群或  $O$  群的点群对称性, 则系统能量最高只能支持 3 重简并。若存在高于 3 重简并的能级, 则体系存在参数依赖的偶然简并, 或者有额外的对称性未被发现。

**例 5.2.** 氢原子具有旋转对称性, 哈密顿量算符群应为  $SO(3)$  群, 以  $\ell$  标记其不可约表示, 只能有  $2\ell + 1$  重简并能级。然而实际上氢原子能级的简并情况如图 5.1 所示, 能级简并情况至于主量子数  $n$  有关, 简并度为  $n^2$ , 并非  $2\ell + 1$  重简并, 其原因为氢原子具有更高的对称性, 哈密顿量算符群实际为  $SO(4)$  群。

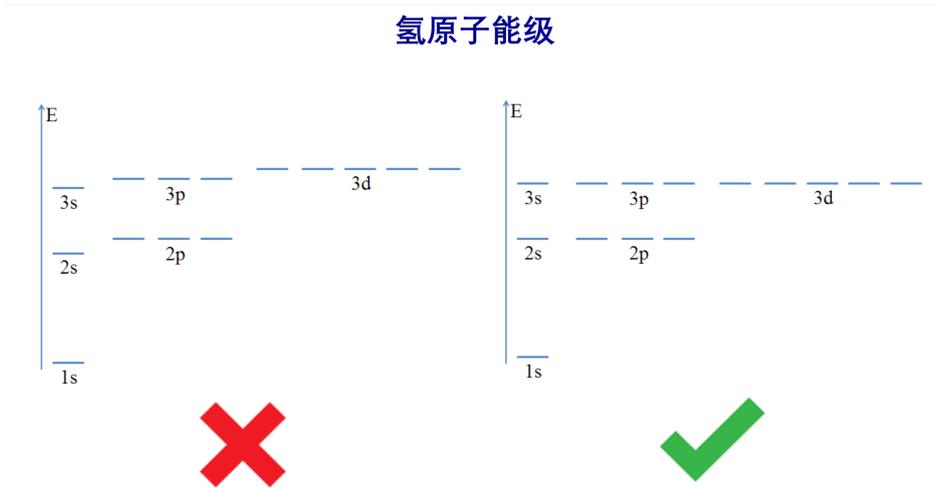


图 5.1: 氢原子能级。

氢原子的哈密顿量为

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \frac{\mathbf{p}^2}{2m} - \frac{k}{r}, \quad (5.16)$$

其中  $k = e^2$ 。在库伦势  $-k/r$  下，体系存在一个额外的守恒量

$$\mathbf{A} = \mathbf{p} \times \mathbf{L} - mk\hat{\mathbf{r}}, \quad (5.17)$$

该矢量称为 Laplace-Runge-Lenz 矢量，其中  $\mathbf{L}$  为角动量， $\hat{\mathbf{r}} = \mathbf{r}/r$ 。在量子力学中，将其改写为厄米算符的形式  $\mathbf{A} = (\mathbf{p} \times \mathbf{L} - \mathbf{L} \times \mathbf{p})/2 - mk\hat{\mathbf{r}}$ ，可以证明  $[\hat{H}, \mathbf{A}] = 0$  及  $\mathbf{A} \cdot \mathbf{L} = 0$ 。 $\mathbf{A}$  的分量满足对易关系

$$[A_i, A_j] = -i\hbar 2m \sum_k \varepsilon_{ijk} \hat{H} L_k, \quad (5.18)$$

由于该对易关系包含哈密顿量  $H$ ，因此一般而言不构成封闭代数。但是哈密顿量的本征态且  $E < 0$ （束缚态），可用能量  $E$  替换  $\hat{H}$ 。定义  $\mathbf{N} = \mathbf{A}/\sqrt{-2mE}$ ，可得到封闭的代数

$$[L_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k, \quad [N_i, L_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} N_k, \quad [N_i, N_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} L_k. \quad (5.19)$$

注意到  $\text{SO}(4)$  群的维度为  $n(n-1)/2 = 6$ ，以上六个生成元的代数实际为  $\text{SO}(4)$  群的李代数。

若进一步定义

$$\mathbf{I} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} + \mathbf{N}), \quad \mathbf{J} = \frac{1}{2}(\mathbf{L} - \mathbf{N}), \quad (5.20)$$

则可以发现

$$[I_i, I_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} I_k, \quad [J_i, J_j] = i\hbar \sum_k \varepsilon_{ijk} J_k, \quad [I_i, J_j] = 0, \quad (5.21)$$

即系统存在两套独立的角动量代数关系，并且可以证明  $[\mathbf{I}, \hat{H}] = [\mathbf{J}, \hat{H}] = 0$ ，算符  $\mathbf{I}^2$  和  $\mathbf{J}^2$  将有本征值  $i(i+1)\hbar^2$  和  $j(j+1)\hbar^2$ ，又因为  $\mathbf{I}^2 - \mathbf{J}^2 = \mathbf{L} \cdot \mathbf{N} = 0$ ，只能有  $i = j$ ，即能级简并度为  $(2i+1)(2j+1) = (2j+1)^2 = n^2$ 。

**例 5.3.** 体系具有中心反演对称性，则宇称 (parity) 为守恒量，哈密顿算符的群为  $G_H = \{E, I\} \cong \mathbb{Z}_2$ 。

势能满足  $V(\mathbf{r}) = V(-\mathbf{r}) = V(I\mathbf{r})$ , 波函数满足  $\hat{P}_I\psi(\mathbf{r}) = \psi(I\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r})$ . 由于  $\mathbb{Z}_2$  群只有两个表示

	$\{E\}$	$\{I\}$
$A_g$	1	1
$A_u$	1	-1

因此波函数在空间反演操作下只有两种可能:

(1)  $\psi(\mathbf{r})$  承载  $A_g$  表示:

$$\hat{P}_I\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad (5.22)$$

称  $\psi(\mathbf{r})$  具有偶宇称, 一般以  $g$  标记具有偶宇称的表示 (gerade 的简写)。

(2)  $\psi(\mathbf{r})$  承载  $A_u$  表示:

$$\hat{P}_I\psi(\mathbf{r}) = -\psi(\mathbf{r}) = \psi(-\mathbf{r}), \quad (5.23)$$

称  $\psi(\mathbf{r})$  具有奇宇称, 一般以  $u$  标记具有奇宇称的表示 (ungerade 的简写)。

**例 5.4.** 二维无限深方势阱。

取  $\hbar = 2m = 1$  为单位, 哈密顿量为

$$\hat{H}(x, y) = -\left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2}\right) + V(x, y), \quad (5.24)$$

势能为

$$V(x, y) = \begin{cases} 0 & \text{if } |x| < \pi, |y| < \pi, \\ \infty & \text{otherwise.} \end{cases} \quad (5.25)$$

哈密顿量算符的群为  $G_H = D_4$ 。  $D_4$  群的特征标表为

$D_4$	$\{e\}$	$2\{C_4\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$B_1$	1	-1	1	1	-1
$B_2$	1	-1	1	-1	1
$E$	2	0	-2	0	0

求解本征方程  $\hat{H}(x, y)\psi(x, y) = E\psi(x, y)$ , 利用分离变量法  $\psi(x, y) = X(x)Y(y)$ ,  $E = E_1 + E_2$ , 求得

$$X(x) = \begin{cases} \sin mx & \text{if } E_1 = m^2, \\ \cos\left(\frac{2m+1}{2}x\right) & \text{if } E_1 = \frac{(2m+1)^2}{4}, \end{cases} \quad (5.26)$$

以及

$$Y(y) = \begin{cases} \sin ny & \text{if } E_2 = n^2, \\ \cos\left(\frac{2n+1}{2}y\right) & \text{if } E_2 = \frac{(2n+1)^2}{4}, \end{cases} \quad (5.27)$$

其中  $m, n$  为非负整数。因此, 总能量  $E$  可取以下 5 种情况:

1.  $E = \frac{(2m+1)^2}{2}$ , 波函数为  $\psi(x, y) = \cos\left(\frac{2m+1}{2}x\right)\cos\left(\frac{2m+1}{2}y\right)$ ;

2.  $E = 2m^2$ , 波函数为  $\psi(x, y) = \sin mx \sin my$ ;
3.  $E = m^2 + n^2$ , 波函数为  $\psi_1(x, y) = \sin mx \sin ny$  或  $\psi_2(x, y) = \sin nx \sin my$ ;
4.  $E = \frac{(2m+1)^2}{4} + \frac{(2n+1)^2}{4}$ , 波函数为  $\psi_1(x, y) = \cos\left(\frac{2m+1}{2}x\right) \cos\left(\frac{2n+1}{2}y\right)$  或  $\psi_2(x, y) = \cos\left(\frac{2n+1}{2}x\right) \cos\left(\frac{2m+1}{2}y\right)$ ;
5.  $E = m^2 + \frac{(2n+1)^2}{4}$ , 波函数为  $\psi_1(x, y) = \sin mx \cos\left(\frac{2n+1}{2}y\right)$  或  $\psi_2(x, y) = \cos\left(\frac{2n+1}{2}x\right) \sin my$ .

以上五种情况中, 情况 1 和 2 是非简并能级, 而情况 3 至 5 是 2 重简并能级。现在利用  $D_4$  群的不可约表示标记不同能级, 根据  $\hat{P}_g \psi(\mathbf{r}) = \psi(g^{-1}\mathbf{r})$  得到

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{C_4} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(C_4^{-1}\mathbf{r}) = \psi(y, -x), \\
 \hat{P}_{C_4^2} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(C_4^2\mathbf{r}) = \psi(-x, -y), \\
 \hat{P}_{C_2^{(1)}} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(C_2^{(1)}\mathbf{r}) = \psi(x, -y), \\
 \hat{P}_{C_2^{(2)}} \psi(\mathbf{r}) &= \psi(C_2^{(2)}\mathbf{r}) = \psi(y, x).
 \end{aligned} \tag{5.28}$$

1.  $E = \frac{(2m+1)^2}{2}$ : 可以验证  $\forall g \in D_4$ , 都有  $\hat{P}_g \psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$ , 因此承载 1 维恒等表示  $A_1$ ;
2.  $E = 2m^2$ : 可以验证

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{C_4} \psi(\mathbf{r}) &= -\sin mx \sin my = -\psi(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_4^2} \psi(\mathbf{r}) &= \sin mx \sin my = \psi(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_2^{(1)}} \psi(\mathbf{r}) &= -\sin mx \sin my = -\psi(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_2^{(2)}} \psi(\mathbf{r}) &= \sin mx \sin my = \psi(\mathbf{r}),
 \end{aligned} \tag{5.29}$$

特征标为

	$\{e\}$	$2\{C_4\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
$\chi(g)$	1	-1	1	-1	1

对比可知承载  $B_2$  表示。

3.  $E = m^2 + n^2$ : 可以验证

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_{C_4} \psi_1(\mathbf{r}) &= -\psi_2(\mathbf{r}), \quad \hat{P}_{C_4} \psi_2(\mathbf{r}) = -\psi_1(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_4^2} \psi_1(\mathbf{r}) &= \psi_1(\mathbf{r}), \quad \hat{P}_{C_4^2} \psi_2(\mathbf{r}) = \psi_2(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_2^{(1)}} \psi_1(\mathbf{r}) &= -\psi_1(\mathbf{r}), \quad \hat{P}_{C_2^{(1)}} \psi_2(\mathbf{r}) = -\psi_2(\mathbf{r}), \\
 \hat{P}_{C_2^{(2)}} \psi_1(\mathbf{r}) &= \psi_2(\mathbf{r}), \quad \hat{P}_{C_2^{(2)}} \psi_2(\mathbf{r}) = \psi_1(\mathbf{r}),
 \end{aligned}$$

因此表示矩阵为

$$A(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ -1 & 0 \end{pmatrix}, \quad A(C_4^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \tag{5.30}$$

特征标为

	$\{e\}$	$2\{C_4\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
$\chi(g)$	2	0	2	-2	0

对比可知承载  $A_2 \oplus B_2$  表示, 是可约表示。可以验证在加入保持对称性的微扰项  $\hat{H}' = \lambda x^2 y^2$  后, 微扰矩阵元为

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon_1 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & \epsilon_1 \end{pmatrix}, \quad (5.31)$$

其中

$$\epsilon_1 = \frac{\lambda \pi^2}{36 m^2 n^2} (2m^2 \pi^2 - 3) (2n^2 \pi^2 - 3), \quad \epsilon_2 = \frac{64 \lambda m^2 n^2 \pi^2}{(m^2 - n^2)^4}, \quad (5.32)$$

由简并态微扰理论知一阶微扰修正后的能量为

$$E'_\pm = m^2 + n^2 + \epsilon_1 \pm \epsilon_2, \quad (5.33)$$

即偶然简并解除。

4.  $E = \frac{(2m+1)^2}{4} + \frac{(2n+1)^2}{4}$ : 可以验证表示矩阵为

$$A(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad A(C_4^2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.34)$$

特征标为

	$\{e\}$	$2\{C_4\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
$\chi(g)$	2	0	2	2	0

对比可知承载  $A_1 \oplus B_1$  表示, 是可约表示。可以验证在加入微扰项  $\hat{H}' = \lambda x^2 y^2$  后, 该偶然简并会发生劈裂。

5.  $E = m^2 + \frac{(2n+1)^2}{4}$ : 可以验证表示矩阵为

$$A(C_4) = \begin{pmatrix} 0 & -1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} \quad A(C_4^2) = \begin{pmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(1)}) = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A(C_2^{(2)}) = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5.35)$$

特征标为

	$\{e\}$	$2\{C_4\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$
$\chi(g)$	2	0	-2	0	0

对比可知承载  $E$  表示, 为 2 维不可约表示, 因此该简并为必然简并。考虑微扰项  $\hat{H}' = \lambda x^2 y^2$  后, 微扰矩阵元为

$$\begin{pmatrix} \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \langle \psi_1 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle \\ \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_1 \rangle & \langle \psi_2 | \hat{H}' | \psi_2 \rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \epsilon & 0 \\ 0 & \epsilon \end{pmatrix}, \quad (5.36)$$

其中

$$\epsilon = \frac{\lambda \pi^2}{18(m+2mn)^2} (2m^2 \pi^2 - 3) [\pi^2 (1+2n)^2 - 6], \quad (5.37)$$

因此微扰修正后的能量为

$$E' = m^2 + \frac{(2n+1)^2}{4} + \epsilon, \quad (5.38)$$

不会解除二重简并。

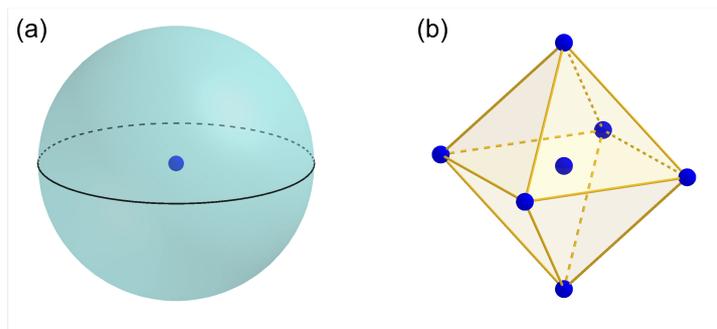


图 5.2: (a) 中心力场。(b) 八面体力场。

## 5.2 微扰引起的能级分裂

前一节表明哈密顿量相同能量的本征态承载哈密顿算符群至少一个不可约表示，这一节考虑在原有的哈密顿量  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  上加入降低其对称性的微扰项  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  后能级的劈裂。 $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  的哈密顿算符群为  $P_{G_{H_0}}$ ，考虑微扰项后  $\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \hat{H}'(\mathbf{r})$  的哈密顿算符群为  $P_{G_H}$ ， $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的加入对对称性的影响分为以下两种情况：

1.  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的对称性高于或等于  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  的对称性，加入微扰后  $P_{G_H}$  与  $P_{G_{H_0}}$  相同，原来的必然简并仍不劈裂，但偶然简并可能发生劈裂。
2.  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的对称性比  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  的低，加入微扰后  $P_{G_H}$  为  $P_{G_{H_0}}$  的子群， $P_{G_{H_0}}$  中的不可约表示分导到  $P_{G_H}$  可能变为可约表示，即发生能带劈裂。

以下使用中心力场的电子态在八面体场下的能级分裂展示微扰导致的对称性降低现象。在原子极限下，电子感受到原子核的库伦势  $V_C(\mathbf{r}) = -k/r$ ，哈密顿量为  $\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \mathbf{p}^2/2m - k/r$ 。仅考虑纯转动操作，此时的哈密顿算符群为  $P_{G_{H_0}} \cong \text{SO}(3)$ ，如图5.2(a)所示。将此体系放入一八面体体心，八面体的顶点为其他原子，原来的电子还会感受到顶点原子的库伦作用

$$V_O(\mathbf{r}) = -\sum_{i=1}^6 \frac{k}{|\mathbf{R}_i - \mathbf{r}|}, \quad (5.39)$$

其中  $\mathbf{R}_i$  表示 6 个顶点原子的位置矢量。 $V_O(\mathbf{r})$  并不具有  $\text{SO}(3)$  的对称性，而是具有  $O$  群的点群对称性，如图5.2(b)所示。若顶点原子与体心原子的距离远大于玻尔半径，则  $V_O(\mathbf{r})$  相对于  $\hat{H}_0(\mathbf{r})$  则可认为是微扰项，微扰项的对称性低于原体系的对称性，哈密顿算符群为  $P_{G_H} \cong O$ ，是  $P_{G_{H_0}}$  的子群。分析加入微扰后能级是否发生分裂，需要考察  $P_{G_{H_0}} \cong \text{SO}(3)$  的不可约表示分导至子群  $P_{G_H} \cong O$  中，是否仍为子群的不可约表示。

$\text{SO}(3)$  群的不可约表示由  $\ell$  标记， $\ell$  为非负整数，不可约表示维度为  $2\ell + 1$ ，基函数为球谐函数

$$Y_\ell^m(\theta, \varphi) = P_\ell^m(\cos \theta) e^{im\varphi}, \quad (5.40)$$

其中  $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell$ 。球谐函数的具体定义见 3.2 节。前两个表示的基函数为：

角量子数	磁量子数	轨道标记	基函数	备注
$\ell = 0$	$m = 0$	$s$	$Y_0^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{1}{\pi}}$	1 维恒等表示
$\ell = 1$	$m = -1, 0, 1$	$p$	$Y_1^{-1}(\theta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\varphi}$ $Y_1^0(\theta, \varphi) = \frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \cos \theta$ $Y_1^1(\theta, \varphi) = -\frac{1}{2}\sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\varphi}$	3 维不可约表示

$O$	$\{e\}$	$8\{C_3\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{C_2\}$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$E$	2	-1	2	0	0
$T_1$	3	0	-1	1	-1
$T_2$	3	0	-1	-1	1

表 5.1:  $O$  群特征标表。

利用特征标理论判断  $SO(3)$  群的 3 维表示  $A^1$  在  $O$  群中是否发生劈裂。 $O$  群的特征标表如表 5.1 所示。考虑相应操作对球谐函数的作用, 如  $C_3$  对应的函数变换算符  $P_{C_3}$  对基函数的变换为

$$\begin{aligned}
P_{C_3}Y_1^{-1}(\theta, \varphi) &= Y_1^{-1}(C_3^{-1}(\theta, \varphi)) = Y_1^{-1}\left(\theta, \varphi - \frac{2\pi}{3}\right) = e^{i2\pi/3}Y_1^{-1}(\theta, \varphi), \\
P_{C_3}Y_1^0(\theta, \varphi) &= Y_1^0(C_3^{-1}(\theta, \varphi)) = Y_1^0(\theta, \varphi), \\
P_{C_3}Y_1^1(\theta, \varphi) &= Y_1^1(C_3^{-1}(\theta, \varphi)) = e^{-i2\pi/3}Y_1^1(\theta, \varphi),
\end{aligned} \tag{5.41}$$

因此,  $C_3$  的特征标为  $\chi_{C_3} = 1 + e^{i2\pi/3} + e^{-i2\pi/3} = 0$ 。同理,  $C_4^2$  对基函数的作用为

$$\begin{aligned}
P_{C_4^2}Y_1^{-1}(\theta, \varphi) &= Y_1^{-1}\left((C_4^2)^{-1}(\theta, \varphi)\right) = Y_1^{-1}(\theta, \varphi - \pi) = e^{i\pi}Y_1^{-1}(\theta, \varphi), \\
P_{C_4^2}Y_1^0(\theta, \varphi) &= Y_1^0\left((C_4^2)^{-1}(\theta, \varphi)\right) = Y_1^0(\theta, \varphi), \\
P_{C_4^2}Y_1^1(\theta, \varphi) &= Y_1^1\left((C_4^2)^{-1}(\theta, \varphi)\right) = e^{-i\pi}Y_1^1(\theta, \varphi),
\end{aligned} \tag{5.42}$$

因此  $\chi_{C_4^2} = 1 + e^{i\pi} + e^{-i\pi} = -1$ 。其他操作的特征标可类似求出。或者, 可以使用  $SO(3)$  群不可约表示特征标公式  $\chi^\ell(\alpha) = \frac{\sin(\ell+1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)}$  计算相应操作的特征标。

利用特征标公式算出  $SO(3)$  群前四个不可约表示到其子群  $O$  群的分导表示的特征标为

	$\{e\}$	$8\{C_3\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{C_2\}$
$s _O$	1	1	1	1	1
$p _O$	3	0	-1	1	-1
$d _O$	5	-1	1	-1	1
$f _O$	7	1	-1	-1	-1

因此,  $s$  态分导为  $O$  群的 1 维恒等表示  $A_1$ ,  $p$  态分导为  $T_1$  表示, 简并能级不分裂, 而  $d$  态的分导表示为  $E \oplus T_2$ , 五重简并能级分裂为二重简并能级和三重简并能级, 如图 5.3 所示, 这种能级劈裂称为晶体场劈裂 (Crystal field splitting)。若进一步考虑空间反演操作, 考虑八面体场微扰后的哈密顿算符群为  $G_{P_H} \cong O_h$ ,  $d$  态分裂为  $A^d = E_g \oplus T_{2g}$ ,  $g$  表示偶宇称, 常见于过渡金属氧化物电子态的讨论。

若进一步降低对称性, 将八面体场沿  $z$  方向拉伸, 哈密顿算符群变为  $P_{G_H} \cong D_4$ ,  $D_4$  群特征标表及  $O$  群的  $E$  表示和  $T_2$  表示在  $D_4$  中的分导表示如表 5.2 所示。具体群元的对应关系见例 2.29。因此,  $O$  群的  $E$  表示分裂为  $A_1$  和  $B_1$  表示, 而  $T_2$  表示分裂为  $E$  表示和  $B_2$ 。这种对称性降低导致的能级分裂有时会使系统能量降低, 称为 Jahn-Teller 效应。

图 5.3 与图 5.4 等都描述一个群的不可约表示与其子群不可约表示间的关系, 这种关系称为相容性原理。



### 5.3 投影算符

上一节对能级劈裂的判断利用到表示的特征标, 然而群表示的确定依赖于基函数的选取, 约化表示空间, 只需约化基函数即可。以下将以  $D_3$  群为例, 展示齐次函数基的约化。

已知  $D_3$  群在  $\mathbb{R}^3$  中的表示矩阵为

$$\begin{aligned} A(e) &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(d) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A(f) = \begin{pmatrix} -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \\ A(a) &= \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A(b) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \quad A(c) = \begin{pmatrix} \frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} & 0 \\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}, \end{aligned} \quad (5.43)$$

由此可知  $D_3$  群操作对二次齐次函数  $\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$  的作用。以群元  $d$  为例, 对应的函数变换算符  $\hat{P}_d$  作用在六个基函数分别为 (具体计算见例 2.8)

$$\begin{aligned} \hat{P}_d x^2 &= (d^{-1}x)^2 = (fx)^2 = \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right)^2 = \frac{1}{4}x^2 + \frac{3}{4}y^2 - \frac{\sqrt{3}}{2}xy, \\ \hat{P}_d y^2 &= (fy)^2 = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right)^2 = \frac{3}{4}x^2 + \frac{1}{4}y^2 + \frac{\sqrt{3}}{2}xy, \\ \hat{P}_d z^2 &= (fz)^2 = z^2, \\ \hat{P}_d xy &= (fx)(fy) = \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right) \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right) = \frac{\sqrt{3}}{4}x^2 - \frac{\sqrt{3}}{4}y^2 - \frac{1}{2}xy, \\ \hat{P}_d xz &= (fx)(fz) = \left(-\frac{1}{2}x + \frac{\sqrt{3}}{2}y\right)z = -\frac{1}{2}xz + \frac{\sqrt{3}}{2}yz, \\ \hat{P}_d yz &= (fy)(fz) = \left(-\frac{\sqrt{3}}{2}x - \frac{1}{2}y\right)z = -\frac{\sqrt{3}}{2}xz - \frac{1}{2}yz. \end{aligned} \quad (5.44)$$

注意到以  $x^2 + y^2$  作为一个函数, 满足

$$\hat{P}_d (x^2 + y^2) = x^2 + y^2, \quad (5.45)$$

而用  $x^2 - y^2$  作为一个函数, 满足

$$\hat{P}_d (x^2 - y^2) = -\frac{1}{2}(x^2 - y^2) - \sqrt{3}xy, \quad (5.46)$$

而  $\hat{P}_d xy$  亦可用函数  $x^2 - y^2$  与  $xy$  的线性叠加表示

$$\hat{P}_d xy = \frac{\sqrt{3}}{4}(x^2 - y^2) - \frac{1}{2}xy. \quad (5.47)$$

因此, 重新组合基函数后, 以  $x^2 + y^2$  及  $\{x^2 - y^2, xy\}$  为新的基函数可以分别构成 1 维和 2 维的函数空间, 看上去可以承载  $D_3$  群的一个 1 维和 2 维表示。当取遍历  $D_3$  群所有群元后, 可以发现上述猜测的确是成立的, 即可将初始的 6 维表示空间  $\{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$  约化为  $\{x^2 + y^2\}, \{x^2 - y^2, xy\}, \{xz, yz\}, \{z^2\}$  这些表示空间的直和, 此结果与利用特征标理论判断是一致的, 根据特征标, 也能得到此 6 维表示可约化为  $2A_1 \oplus 2E$ , 即  $\{x^2 + y^2\}$  和  $\{z^2\}$  作为基函数, 都承载 1 维的  $A_1$  表示, 而  $\{x^2 - y^2, xy\}, \{xz, yz\}$  都承载 2

维的  $E$  表示。相比于根据特征标判断, 约化基函数不仅能给出表示空间的约化信息, 更能给出约化后表示空间的基函数信息。

因此, 如何从任意基函数出发, 寻找完整的承载不可约表示的基函数, 是约化基函数的核心。这一过程可用投影算符完成。

§ **定义 5.3. 投影算符** 线性空间  $V$  上的线性算符  $P$ , 若满足  $P^2 = P$ , 则称  $P$  是  $V$  上的一个投影算符。

该定义可用以下例子来理解:

**例 5.5.**  $\mathbb{R}^3$  中对  $xy$  面 ( $\mathbb{R}^2$ ) 的投影  $P$  是投影算符。因为  $P\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\parallel}$ , 其中  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_{\parallel} + r_z\hat{z}$ , 而  $P^2\mathbf{r} = P\mathbf{r}_{\parallel} = \mathbf{r}_{\parallel}$ , 即  $P^2 = P$ 。

关于投影算符有以下几点说明。

**注 1.**  $P$  的值域为  $R_P = PV = \{\mathbf{z} \in V | \mathbf{z} = P\mathbf{r}, \mathbf{r} \in V\}$ 。

**注 2.**  $P$  的核为  $N_P = \{\mathbf{z}' \in V | P\mathbf{z}' = \mathbf{0}\}$ 。

**注 3.**  $\forall \mathbf{z} \in R_P, P\mathbf{z} = \mathbf{z}$ 。

**注 4.** 若  $P$  为  $V$  上的投影算符, 则  $I-P$  也是投影算符 ( $I$  为恒等算符), 因为  $(I-P)^2 = (I-P) - (P-P) = I-P$ 。

**注 5.** 若  $V$  上存在投影算符  $P$ , 则  $V = R_P \oplus N_P$ ; 反之, 若  $V = W_1 \oplus W_2$ , 则一定存在相应的投影算符。

实际上, 最后一点可以推广为更一般的形式再加以证明, 表现为以下定理。

■ **定理 5.4.** 若线性空间  $V = W_1 \oplus W_2 \oplus \cdots \oplus W_k$ , 则  $V$  上存在投影算符  $P_1, P_2, \cdots, P_k$ , 满足:

1.  $P_i^2 = P_i$ ;
2. 若  $i \neq j$ , 则  $P_i P_j = 0$ ;
3.  $P_1 + P_2 + \cdots + P_k = I$ ;
4.  $P_i V = W_i, i = 1, 2, \cdots, k$ 。

反之, 若线性空间  $V$  上存在算符满足上面四个条件, 则  $V = W_1 \oplus W_2 \oplus \cdots \oplus W_k$ 。

将投影算符应用至表示空间, 得到以下定理。

■ **定理 5.5.** 设  $n$  阶群  $G$  的不可约酉表示为  $A^\alpha, \alpha = 1, 2, \cdots, q$ , 维数为  $s_\alpha$ 。  $P$  为  $G$  对应的算符群,  $P_G = \{\hat{P}_g | g \in G\}$ 。定义算符

$$\hat{P}_{kj}^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g \in G} A_{kj}^{(\alpha)*}(g) \hat{P}_g,$$

则这些算符满足下列关系

$$\hat{P}_{kj}^{(\alpha)} \hat{P}_{il}^{(\beta)} = \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \hat{P}_{kl}^{(\alpha)},$$

且  $\hat{P}_{jj}^{(\alpha)}$  为投影算符。

证明. 直接代入有

$$\begin{aligned}\hat{P}_{kj}^{(\alpha)} \hat{P}_{il}^{(\beta)} &= \frac{s_\alpha s_\beta}{n^2} \sum_{g, g'} A_{kj}^{(\alpha)*}(g) \hat{P}_g A_{il}^{(\beta)*}(g') \hat{P}_{g'} \\ &= \frac{s_\alpha s_\beta}{n^2} \sum_{g, g'} A_{kj}^{(\alpha)*}(g) A_{li}^{(\beta)}(g'^{-1}) \hat{P}_{gg'},\end{aligned}\quad (5.48)$$

其中已利用酉表示的性质  $A^\dagger(g) = A^{-1}(g) = A(g^{-1})$ , 或  $A_{ji}^*(g) = A_{ij}(g)$ 。令  $gg' = g''$ ,  $g'^{-1} = g''^{-1}g$ , 则

$$\begin{aligned}\hat{P}_{kj}^{(\alpha)} \hat{P}_{il}^{(\beta)} &= \frac{s_\alpha s_\beta}{n^2} \sum_{g, g''} A_{kj}^{(\alpha)*}(g) A_{li}^{(\beta)}(g''^{-1}g) \hat{P}_{g''} \\ &= \frac{s_\alpha s_\beta}{n^2} \sum_{g, g''} \sum_{m=1}^{s_\beta} A_{kj}^{(\alpha)*}(g) A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1}) A_{mi}^{(\beta)}(g) \hat{P}_{g''} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g''} \sum_{m=1}^{s_\beta} \left[ \frac{s_\beta}{n} \sum_g A_{kj}^{(\alpha)*}(g) A_{mi}^{(\beta)}(g) \right] A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1}) \hat{P}_{g''} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g''} \sum_{m=1}^{s_\beta} \delta_{\alpha\beta} \delta_{km} \delta_{ij} A_{lm}^{(\beta)}(g''^{-1}) \hat{P}_{g''} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_g \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} A_{kl}^{(\alpha)*}(g) \hat{P}_g \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \hat{P}_{kl}^{(\alpha)},\end{aligned}\quad (5.49)$$

其中已利用正交性定理。 $\hat{P}_{kj}^{(\alpha)}$  并非投影算符, 但对角项  $\hat{P}_{jj}^{(\alpha)}$  为投影算符, 利用正交性定理容易证明

$$\left[ \hat{P}_{jj}^{(\alpha)} \right]^2 = \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g''} \sum_{m=1}^{s_\alpha} \delta_{jm} A_{mj}^{(\alpha)*}(g'') \hat{P}_{g''} = \hat{P}_{jj}^{(\alpha)}.\quad (5.50)$$

□

对所有不可约表示的对角项  $\hat{P}_{jj}^{(\alpha)}$  求和, 仍是投影算符, 并且是恒等算符。

■ **定理 5.6.**  $\sum_{\alpha=1}^q \sum_{j=1}^{s_\alpha} \hat{P}_{jj}^{(\alpha)} = \hat{P}_e$ , 其中  $\hat{P}_e$  为恒等算符。

该定理证明见李新征《群论及其在凝聚态物理中的应用》第四章 4.3 节。

有了上述算符, 我们可以定义不可约表示的对称化基函数。

■ **定理 5.7. 有限群不可约表示基函数定理 1** 设  $P_G = \{ \hat{P}_g | g \in G \}$  是群  $G$  的算符群 (相当于前文提及的哈密顿算符群), 由它可以定义算符  $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)}$ 。一组基函数  $\varphi_i^{(\alpha)}$ ,  $i = 1, 2, \dots, s_\alpha$  构成群  $G$  的第  $\alpha$  个不可约酉表示基函数的充要条件是

$$\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} = \varphi_i^{(\alpha)},$$

其中  $\varphi_i^{(\alpha)}$  称为对称化基函数。

证明. 充分性:

由  $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} = \varphi_i^{(\alpha)}$  知对任意  $g \in G$ ,

$$\begin{aligned}\hat{P}_g \varphi_i^{(\alpha)} &= \hat{P}_g \hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \hat{P}_g \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g' \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g') \hat{P}_{g'} \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g' \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g') \hat{P}_{gg'} \varphi_j^{(\alpha)},\end{aligned}\quad (5.51)$$

令  $gg' = g''$  有

$$\begin{aligned}\hat{P}_g \varphi_i^{(\alpha)} &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g'' \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g^{-1}g'') \hat{P}_{g''} \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g'' \in G} \sum_{m=1}^{s_\alpha} A_{im}^{(\alpha)*}(g^{-1}) A_{mj}^{(\alpha)*}(g'') \hat{P}_{g''} \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \sum_{m=1}^{s_\alpha} A_{im}^{(\alpha)*}(g^{-1}) \left[ \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g'' \in G} A_{mj}^{(\alpha)*}(g'') \hat{P}_{g''} \right] \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \sum_{m=1}^{s_\alpha} A_{im}^{(\alpha)*}(g^{-1}) \hat{P}_{mj}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} \\ &= \sum_{m=1}^{s_\alpha} A_{mi}^{(\alpha)}(g) \varphi_m^{(\alpha)},\end{aligned}\quad (5.52)$$

即  $\varphi_i^{(\alpha)}$  ( $i = 1, 2, \dots, s_\alpha$ ) 构成群  $G$  的第  $\alpha$  个不可约酉表示的基函数。

必要性:

设  $\varphi_i^{(\beta)}$  ( $i = 1, 2, \dots, s_\beta$ ) 构成群  $G$  的第  $\beta$  个不可约酉表示的基函数, 则

$$\hat{P}_g \varphi_j^{(\beta)} = \sum_{m=1}^{s_\beta} A_{mj}^{(\beta)}(g) \varphi_m^{(\beta)}.\quad (5.53)$$

因此

$$\begin{aligned}\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \varphi_k^{(\beta)} &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g) \hat{P}_g \varphi_k^{(\beta)} \\ &= \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g) \sum_{m=1}^{s_\beta} A_{mk}^{(\beta)}(g) \varphi_m^{(\beta)} \\ &= \sum_{m=1}^{s_\beta} \left[ \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g \in G} A_{ij}^{(\alpha)*}(g) A_{mk}^{(\beta)}(g) \right] \varphi_m^{(\beta)} \\ &= \sum_{m=1}^{s_\alpha} \delta_{im} \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta} \varphi_m^{(\beta)} \\ &= \delta_{jk} \delta_{\alpha\beta} \varphi_i^{(\alpha)},\end{aligned}\quad (5.54)$$

取  $\alpha = \beta, j = k$ , 即满足  $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)} \varphi_j^{(\alpha)} = \varphi_i^{(\alpha)}$ . □

从一个对称化基函数  $\varphi_j^{(\alpha)}$  出发, 利用  $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)}$  可求得第  $\alpha$  个表示所有的对称化基函数。然而使用  $\hat{P}_{ij}^{(\alpha)}$  的缺点是需要所有表示矩阵元, 并且群表示矩阵不唯一, 群表示矩阵之间可相差相似变换。因此, 更加常见的是利用特征标定义的特征标投影算符得到对称化基函数。

§ 定义 5.4. 特征标投影算符  $\hat{P}^{(\alpha)} = \sum_{j=1}^{s_\alpha} \hat{P}_{jj}^{(\alpha)} = \frac{s_\alpha}{n} \sum_{g \in G} \chi^{(\alpha)*} \hat{P}_g$ 。

利用特征标投影算符, 可以得到承载不可约表示的基函数。由完备性定理, 有限群  $G$  的表示空间  $V$  中任意一个矢量  $\psi$  都能展开为

$$\psi = \sum_i \sum_{\alpha=1}^q \sum_{l=1}^{s_\alpha} a_{il}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\alpha)}, \quad (5.55)$$

其中  $\alpha$  表示不等价不可约表示指标,  $l$  表示同一个不可约表示中基的指标,  $i$  表示每个不等价不可约表示重复的指标。比如一个 6 维表示空间  $V$  可约化为  $V = 2A_1 \oplus 2A_3$ , 其中  $A_1$  和  $A_3$  分别为 1 维和 2 维不等价不可约表示, 则其存在的基函数可以表示为  $\{\varphi_{11}^{(1)}\}, \{\varphi_{21}^{(1)}\}$  (承载两个 1 维  $A_1$  表示) 和  $\{\varphi_{11}^{(3)}, \varphi_{12}^{(3)}\}, \{\varphi_{21}^{(3)}, \varphi_{22}^{(3)}\}$  (承载两个 2 维  $A_3$  表示)。将特征标投影算符作用在矢量  $\psi$  上有

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(\alpha)} \psi &= \sum_i \sum_{\beta=1}^q \sum_{l=1}^{s_\beta} a_{il}^{(\beta)} \hat{P}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\beta)} \\ &= \sum_i \sum_{\beta=1}^q \sum_{l=1}^{s_\beta} a_{il}^{(\beta)} \sum_{j=1}^{s_\alpha} \hat{P}_{jj}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\beta)} \\ &= \sum_i \sum_{\beta=1}^q \sum_{l=1}^{s_\beta} a_{il}^{(\beta)} \sum_{j=1}^{s_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{jl} \varphi_{ij}^{(\alpha)} \\ &= \sum_i \sum_{l=1}^{s_\alpha} a_{il}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\alpha)}, \end{aligned} \quad (5.56)$$

其中第三个等号利用了式 (5.54)。可见  $\hat{P}^{(\alpha)}$  将属于第  $\alpha$  个不等价不可约表示的基函数提取出来。

例 5.6.  $D_3$  群, 取  $\{\varphi_1, \dots, \varphi_6\} = \{x^2, y^2, z^2, xy, xz, yz\}$ , 利用特征标投影算符构造对称化基函数。

$D_3$  群的特征标表为

$D_3$	$\{e\}$	$2\{d\}$	$3\{a\}$
$A_1$	1	1	1
$A_2$	1	1	-1
$A_3$	2	-1	0

构造特征标投影算符

$$\begin{aligned} \hat{P}^{(1)} &= \frac{1}{6} (\hat{P}_e + \hat{P}_d + \hat{P}_f + \hat{P}_a + \hat{P}_b + \hat{P}_c), \\ \hat{P}^{(2)} &= \frac{1}{6} (\hat{P}_e + \hat{P}_d + \hat{P}_f - \hat{P}_a - \hat{P}_b - \hat{P}_c), \\ \hat{P}^{(3)} &= \frac{2}{6} (2\hat{P}_e - \hat{P}_d - \hat{P}_f). \end{aligned}$$

群元函数算符作用在基函数上的结果为

	$x^2$	$y^2$	$z^2$	$xy$	$xz$	$yz$
$\hat{P}_e$	$x^2$	$y^2$	$z^2$	$xy$	$xz$	$yz$
$\hat{P}_d$	$\frac{x^2}{4} + \frac{3y^2}{4} - \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$\frac{3x^2}{4} + \frac{y^2}{4} + \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$z^2$	$\frac{\sqrt{3}x^2}{4} - \frac{\sqrt{3}y^2}{4} - \frac{xy}{2}$	$-\frac{xz}{2} + \frac{\sqrt{3}yz}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}xz}{2} - \frac{yz}{2}$
$\hat{P}_f$	$\frac{x^2}{4} + \frac{3y^2}{4} + \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$\frac{3x^2}{4} + \frac{y^2}{4} - \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$z^2$	$-\frac{\sqrt{3}x^2}{4} + \frac{\sqrt{3}y^2}{4} - \frac{xy}{2}$	$-\frac{xz}{2} - \frac{\sqrt{3}yz}{2}$	$\frac{\sqrt{3}xz}{2} - \frac{yz}{2}$
$\hat{P}_a$	$x^2$	$y^2$	$z^2$	$-xy$	$xz$	$-yz$
$\hat{P}_b$	$\frac{x^2}{4} + \frac{3y^2}{4} + \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$\frac{3x^2}{4} + \frac{y^2}{4} - \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$z^2$	$\frac{\sqrt{3}x^2}{4} - \frac{\sqrt{3}y^2}{4} + \frac{xy}{2}$	$\frac{xz}{2} + \frac{\sqrt{3}yz}{2}$	$\frac{\sqrt{3}xz}{2} - \frac{yz}{2}$
$\hat{P}_c$	$\frac{x^2}{4} + \frac{3y^2}{4} - \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$\frac{3x^2}{4} + \frac{y^2}{4} + \frac{\sqrt{3}xy}{2}$	$z^2$	$-\frac{\sqrt{3}x^2}{4} + \frac{\sqrt{3}y^2}{4} + \frac{xy}{2}$	$\frac{xz}{2} - \frac{\sqrt{3}yz}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}xz}{2} - \frac{yz}{2}$

代入特征标投影算符得

	$x^2$	$y^2$	$z^2$	$xy$	$xz$	$yz$
$\hat{P}^{(1)}$	$\frac{1}{2}(x^2 + y^2)$	$\frac{1}{2}(x^2 + y^2)$	$z^2$	0	0	0

可以发现函数  $\frac{1}{2}(x^2 + y^2)$  和  $z^2$  都承载  $A_1$  不等价不可约表示, 对应对称化基函数为

$$\varphi_{11}^{(1)} = \frac{1}{2}(x^2 + y^2), \varphi_{21}^{(1)} = z^2.$$

同理有

	$x^2$	$y^2$	$z^2$	$xy$	$xz$	$yz$
$\hat{P}^{(2)}$	0	0	0	0	0	0
$\hat{P}^{(3)}$	$\frac{1}{2}(x^2 - y^2)$	$-\frac{1}{2}(x^2 - y^2)$	0	$xy$	$xz$	$yz$

显然六个函数都不承载  $A_2$  表示。剩余的四个函数  $\frac{1}{2}(x^2 - y^2), xy, xz, yz$  都承载  $A_3$  表示, 且  $A_3$  为 2 维表示, 因此需要判断四个函数如何两两组合构成  $A_3$  表示的基函数。为此, 只需取一个群元算符作用于四个函数上, 以  $\hat{P}_d$  为例, 得到

	$\frac{1}{2}(x^2 - y^2)$	$xy$	$xz$	$yz$
$\hat{P}_d$	$-\frac{1}{4}(x^2 - y^2) - \frac{\sqrt{3}}{2}xy$	$\frac{\sqrt{3}}{4}(x^2 - y^2) - \frac{1}{2}xy$	$-\frac{xz}{2} + \frac{\sqrt{3}yz}{2}$	$-\frac{\sqrt{3}xz}{2} - \frac{yz}{2}$

可见  $\{\frac{1}{2}(x^2 - y^2), xy\}$  被群元联系, 因此承载一个  $A_3$  表示, 同理  $\{xz, yz\}$  也承载一个  $A_3$  表示, 即对称化基函数为

$$\begin{aligned} \varphi_{11}^{(3)} &= \frac{1}{2}(x^2 - y^2), \varphi_{12}^{(3)} = xy, \\ \varphi_{21}^{(3)} &= xz, \varphi_{22}^{(3)} = yz. \end{aligned}$$

在对称化基函数  $\{\varphi_{11}^{(1)}, \varphi_{21}^{(1)}, \varphi_{11}^{(3)}, \varphi_{12}^{(3)}, \varphi_{21}^{(3)}, \varphi_{22}^{(3)}\}$  展开的线性空间中, 写出的表示矩阵具有分块对角形式, 如

$$A(d) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2} \end{pmatrix}.$$

可见寻找对称化基函数的过程即为将表示矩阵分块对角化的过程。

同理, 可以验证, 若以  $\{x, y, z\}$  为基函数, 可得到对称化基函数

$$\varphi_{11}^{(3)} = x, \varphi_{12}^{(3)} = y, \varphi_{11}^{(2)} = z,$$

即  $\{x, y\}$  承载  $A_3$  表示,  $\{z\}$  承载  $A_2$  表示。

对称化基函数的信息可以简化对称性分析, 一般会在特征标表中注明承载不可约表示的一次和二次齐次函数。表 5.3 和 5.4 分别列出承载  $O$  群和  $D_4$  群不可约表示的齐次函数, 用此可直接判断 Jahn-Teller 效应中  $O$  群的  $E$  表示 ( $\{x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2\}$ ) 会劈裂为  $D_4$  群的  $A_1$  表示 ( $x^2 + y^2, z^2$ ) 和  $B_1$  表示 ( $x^2 - y^2$ ), 而  $O$  群的  $T_2$  表示 ( $\{xy, xz, yz\}$ ) 会劈裂为  $D_4$  群的  $E$  表示 ( $\{xz, yz\}$ ) 和  $B_2$  表示 ( $xy$ ), 与上一节利用特征标计算的结果一致。

不可约酉表示的基函数同时具有以下性质。

$O$	$\{e\}$	$8\{C_3\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{C_2\}$	
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	
$E$	2	-1	2	0	0	$(x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2)$
$T_1$	3	0	-1	1	-1	$(x, y, z)$
$T_2$	3	0	-1	-1	1	$(xy, yz, xz)$

表 5.3:  $O$  群特征标表及承载不可约表示的对称化基函数。

$D_4$	$\{e\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_4\}$	$2\{C_2^{(1)}\}$	$2\{C_2^{(2)}\}$	
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$z$
$B_1$	1	1	-1	1	-1	$x^2 - y^2$
$B_2$	1	1	-1	-1	1	$xy$
$E$	2	-2	0	0	0	$(x, y)$ $(xz, yz)$

表 5.4:  $D_4$  群特征标表及承载不可约表示的对称化基函数。

■ **定理 5.8. 有限群不可约表示基函数定理 2 (Wigner-Eckart 定理)** 有限群不等价不可约酉表示的基函数  $\varphi_i^{(\alpha)}$ ,  $i = 1, 2, \dots, s_\alpha$ ,  $\alpha = 1, 2, \dots, q$  满足如下正交关系:

$$\langle \varphi_i^{(\alpha)} | \varphi_j^{(\beta)} \rangle = \delta_{ij} \delta_{\alpha\beta} f^{(\alpha)},$$

其中  $f^{(\alpha)}$  与  $i, j$  无关。

证明. 哈密顿算符群  $P_G = \{\hat{P}_g | g \in G\}$  同态于系统对称群  $G$ , 是群  $G$  的一个酉表示, 即  $\hat{P}_g$  是酉变换 (保持内积不变), 因此有

$$\begin{aligned} \langle \varphi_i^{(\alpha)} | \varphi_j^{(\beta)} \rangle &= \langle \hat{P}_g \varphi_i^{(\alpha)} | \hat{P}_g \varphi_j^{(\beta)} \rangle \\ &= \left\langle \sum_{i'} \varphi_{i'}^{(\alpha)} A_{i'i}^{(\alpha)}(g) \mid \sum_{j'} \varphi_{j'}^{(\beta)} A_{j'j}^{(\beta)}(g) \right\rangle \\ &= \sum_{i'j'} A_{i'i}^{(\alpha)*}(g) A_{j'j}^{(\beta)}(g) \langle \varphi_{i'}^{(\alpha)} | \varphi_{j'}^{(\beta)} \rangle. \end{aligned} \tag{5.57}$$

上式等号左边与群元  $g$  无关, 取遍所有群元有

$$\begin{aligned}
 \langle \varphi_i^{(\alpha)} | \varphi_j^{(\beta)} \rangle &= \frac{1}{n} \sum_{g \in G} \sum_{i'j'} A_{i'i}^{(\alpha)*}(g) A_{j'j}^{(\beta)}(g) \langle \varphi_{i'}^{(\alpha)} | \varphi_{j'}^{(\beta)} \rangle \\
 &= \sum_{i'j'} \left[ \frac{1}{n} \sum_{g \in G} A_{i'i}^{(\alpha)*}(g) A_{j'j}^{(\beta)}(g) \right] \langle \varphi_{i'}^{(\alpha)} | \varphi_{j'}^{(\beta)} \rangle \\
 &= \sum_{i'j'} \frac{1}{s_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{i'j'} \delta_{ij} \langle \varphi_{i'}^{(\alpha)} | \varphi_{j'}^{(\beta)} \rangle \\
 &= \frac{1}{s_\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} \sum_k \langle \varphi_k^{(\alpha)} | \varphi_k^{(\alpha)} \rangle \\
 &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{ij} f^{(\alpha)},
 \end{aligned} \tag{5.58}$$

其中  $f^{(\alpha)} = \frac{1}{s_\alpha} \sum_k \langle \varphi_k^{(\alpha)} | \varphi_k^{(\alpha)} \rangle$  为与  $i, j$  无关的值, 是仅与  $\alpha$  相关的数。□

注. 此处内积定义在基函数所处的函数空间。

若采用前文使用的记号  $\varphi_{il}^{(\alpha)}$ , 则不同的基函数之间, 只有  $\varphi_{il}^{(\alpha)}$  和  $\varphi_{i'l}^{(\alpha)}$  之间是不正交的, 即当同一个不可约表示重复出现时, 对应的基函数不正交。若同时考虑哈密顿量的对称性, 还有以下定理。

■ **定理 5.9.** 若  $\varphi_k^{(\alpha)}$  是哈密顿算符群的第  $\alpha$  个不等价不可约表示的第  $k$  个基, 那么  $\hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_k^{(\alpha)}$  也按照这个群的第  $\alpha$  个不等价不可约表示的第  $k$  个基变化。

证明. 因为  $\varphi_k^{(\alpha)}$  承载哈密顿算符群第  $\alpha$  个不等价不可约表示, 所以对任意  $\hat{P}_g \in P_G$ , 有

$$\hat{P}_g \varphi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \sum_l \varphi_l^{(\alpha)}(\mathbf{r}) A_{lk}^{(\alpha)}(g). \tag{5.59}$$

注意到  $[\hat{H}(\mathbf{r}), \hat{P}_g] = 0$ , 因此

$$\begin{aligned}
 \hat{P}_g [\hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r})] &= \hat{H}(\mathbf{r}) \hat{P}_g \varphi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r}) \\
 &= \sum_l \hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_l^{(\alpha)}(\mathbf{r}) A_{lk}^{(\alpha)}(g) \\
 &= \sum_l [\hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_l^{(\alpha)}(\mathbf{r})] A_{lk}^{(\alpha)}(g),
 \end{aligned} \tag{5.60}$$

即  $\hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_k^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  也是第  $\alpha$  个不等价不可约表示第  $k$  个基函数。□

上述两个关于基函数的定理可用于简化薛定谔方程的计算。一般薛定谔方程难以有解析结果, 因而需要数值求解。求解过程中, 需要选定一组基函数来展开波函数, 如取定  $\varphi_i(\mathbf{r})$ ,  $i = 1, 2, \dots, N$  为一组基函数, 波函数在这组基下展开为

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_{p=1}^N c_p \varphi_p(\mathbf{r}). \tag{5.61}$$

将之代入定态薛定谔方程  $\hat{H}(\mathbf{r}) \psi(\mathbf{r}) = E \psi(\mathbf{r})$  后, 得到

$$\sum_p [\hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_p(\mathbf{r}) c_p - E \varphi_p(\mathbf{r}) c_p] = 0, \tag{5.62}$$

或

$$\sum_p \left[ \int d\mathbf{r} \varphi_q^*(\mathbf{r}) \hat{H}(\mathbf{r}) \varphi_p(\mathbf{r}) - E \int d\mathbf{r} \varphi_q^*(\mathbf{r}) \varphi_p(\mathbf{r}) \right] = 0. \quad (5.63)$$

显然对于  $\varphi_p(\mathbf{r})$  和  $\varphi_q(\mathbf{r})$  的二元运算  $\int d\mathbf{r} \varphi_q^*(\mathbf{r}) \varphi_p(\mathbf{r})$  满足内积的定义, 可表示为基函数的内积  $\langle \varphi_q | \varphi_p \rangle = \int d\mathbf{r} \varphi_q^*(\mathbf{r}) \varphi_p(\mathbf{r})$ 。因此薛定谔方程可表示为矩阵方程

$$\begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1N} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N1} & K_{N2} & \cdots & K_{NN} \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_1 \\ c_2 \\ \vdots \\ c_N \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ \vdots \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (5.64)$$

其中矩阵元为

$$K_{qp} = \langle \varphi_q | \hat{H} | \varphi_p \rangle - E \langle \varphi_q | \varphi_p \rangle. \quad (5.65)$$

解此薛定谔方程即需要解久期方程

$$\det K = \det \begin{pmatrix} K_{11} & K_{12} & \cdots & K_{1N} \\ K_{21} & K_{22} & \cdots & K_{2N} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ K_{N1} & K_{N2} & \cdots & K_{NN} \end{pmatrix} = 0. \quad (5.66)$$

对于一般的基函数  $\varphi_i(\mathbf{r})$ ,  $N \times N$  矩阵  $K$  的矩阵元一般都非零, 求解此久期方程需要的时间复杂度为  $O(N^3)$ , 需要耗费较多计算资源。

若以对称化基函数展开波函数, 即

$$\psi(\mathbf{r}) = \sum_i^q \sum_{\alpha=1}^{s_\alpha} \sum_{l=1}^{s_\alpha} a_{il}^{(\alpha)} \varphi_{il}^{(\alpha)}(\mathbf{r}), \quad (5.67)$$

( $\alpha$  表示不等价不可约表示指标,  $l$  表示同一个不可约表示中基的指标,  $i$  表示每个不等价不可约表示重复的指标) 由定理 5.8 和 5.9 知  $K$  矩阵的矩阵元为

$$\begin{aligned} K_{jn;im}^{\alpha\beta} &= \langle \varphi_{jn}^{(\alpha)} | \hat{H} | \varphi_{im}^{(\beta)} \rangle - E \langle \varphi_{jn}^{(\alpha)} | \varphi_{im}^{(\beta)} \rangle \\ &= \delta_{\alpha\beta} \delta_{mn} K_{jm;im}^{\alpha\alpha}, \end{aligned} \quad (5.68)$$

即此时  $K$  矩阵具有分块对角形式。如六个对称化基函数为  $\varphi_{11}^{(1)}, \varphi_{21}^{(1)}, \varphi_{11}^{(2)}, \varphi_{12}^{(2)}, \varphi_{21}^{(2)}, \varphi_{22}^{(2)}$  (第一个表示是 1 维表示, 出现两次; 第二个表示是 2 维表示, 出现两次), 则  $K$  矩阵为

$$\begin{pmatrix} & \varphi_{11}^{(1)} & \varphi_{21}^{(1)} & \varphi_{11}^{(2)} & \varphi_{21}^{(2)} & \varphi_{12}^{(2)} & \varphi_{22}^{(2)} \\ \varphi_{11}^{(1)} & K_{11;11}^{11} & K_{11;21}^{11} & & & & \\ \varphi_{21}^{(1)} & K_{21;11}^{11} & K_{21;21}^{11} & & & & \\ \varphi_{11}^{(2)} & & & K_{11;11}^{22} & K_{11;21}^{22} & & \\ \varphi_{21}^{(2)} & & & K_{21;11}^{22} & K_{21;21}^{22} & & \\ \varphi_{12}^{(2)} & & & & & K_{12;12}^{22} & K_{12;22}^{22} \\ \varphi_{22}^{(2)} & & & & & K_{22;12}^{22} & K_{22;22}^{22} \end{pmatrix}, \quad (5.69)$$

其余矩阵元为零, 因此可简化久期方程的计算。

### 5.4 矩阵元定理与选择定则

由投影算符和对称化基函数的性质, 可知给定哈密顿量  $\hat{H}_0$ , 其本征态可用对应的哈密顿量算符群的不等价不可约表示的对称化基函数标记, 矩阵元  $\langle \varphi_n^{(\alpha)} | \hat{H}_0 | \varphi_m^{(\beta)} \rangle$  仅有当表示和基函数都相同即  $\alpha = \beta, m = n$  时才不为零。现在若加入微扰哈密顿量  $\hat{H}'$ , 则需要计算微扰矩阵元  $\langle \varphi_n^{(\alpha)} | \hat{H}' | \varphi_m^{(\beta)} \rangle$ 。同样地, 对称性会约束部分微扰矩阵元的值为零。

■ **定理 5.10. 矩阵元定理** 若微扰哈密顿量作用在初态波函数上得到的函数  $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  不包含末态波函数的成分, 即群  $G$  的第  $\beta$  个不可约表示的基  $\varphi_m^{(\beta)}(\mathbf{r})$ , 那么矩阵元  $\langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle = 0$ 。

证明. 此处仅证明不等价不可约表示不重复出现的情形, 若表示可重复出现, 证明过程是类似的。 $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  可用未微扰哈密顿量  $\hat{H}_0$  的算符群的对称化基函数展开, 即

$$\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r}) = \sum_{\gamma=1}^q \sum_{l=1}^{s_\gamma} \varphi_l^{(\gamma)} a_l^{(\gamma)}, \quad (5.70)$$

其中  $a_l^{(\gamma)}$  是展开系数。利用 Wigner-Eckart 定理有

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle &= \sum_{\gamma=1}^q \sum_{l=1}^{s_\gamma} a_l^{(\gamma)} \langle \varphi_m^{(\beta)} | \varphi_l^{(\gamma)} \rangle \\ &= \sum_{\gamma=1}^q \sum_{l=1}^{s_\gamma} a_l^{(\gamma)} \delta_{ml} \delta_{\beta\gamma} f^{(\beta)} \\ &= a_m^{(\beta)} f^{(\beta)}. \end{aligned} \quad (5.71)$$

若  $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  不包含末态波函数  $\varphi_m^{(\beta)}(\mathbf{r})$  的成分, 即  $a_m^{(\beta)} = 0$ , 则矩阵元为零。□

矩阵元定理可进一步用直积表示理解。将  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  视为依赖于坐标的函数, 它会承载  $\hat{H}_0$  的对称群  $G$  的一个表示  $A^\gamma$ ,  $\varphi_m^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  则承载  $A^\alpha$  表示, 一般根据  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的对称性高低可分为两种情况:

1. 若  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的对称性很高, 即  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  承载对称群  $G$  的 1 维恒等表示, 则  $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  承载  $A^\alpha$  表示, 此时  $\beta \neq \alpha$  的矩阵元全部为零, 即为完全禁戒跃迁。
2. 若  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  的对称性较低,  $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  承载直积表示  $A^\gamma \otimes A^\alpha$ , 若  $A^\gamma \otimes A^\alpha$  分解后不包含末态承载的  $A^\beta$  表示, 则矩阵元为零, 此时为部分禁戒跃迁。若分解后包含  $A^\beta$  表示, 则需进一步判断  $\hat{H}'(\mathbf{r}) \varphi_n^{(\alpha)}(\mathbf{r})$  是否包含  $A^\beta$  表示的第  $m$  个基函数  $\varphi_m^{(\beta)}(\mathbf{r})$ , 若包含, 则为允许跃迁。

因此可以使用特征标判断是否发生禁戒跃迁。令  $A^\gamma \otimes A^\alpha = \sum_{\nu=1}^q \oplus m_\nu A^\nu$ , 则如果

$$m_\beta = \frac{1}{n} \sum_g \chi^{\beta*}(g) \chi^\gamma(g) \chi^\alpha(g) = 0, \quad (5.72)$$

则矩阵元  $\langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle = 0$ 。当  $m_\beta \neq 0$  时, 需要进一步分析  $\hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle$  是否包含  $|\varphi_m^{(\beta)}\rangle$  的成分, 若包含, 则为允许跃迁, 否则为禁戒跃迁。这种起源于对称性限制对跃迁矩阵元的约束, 即是选择定则。

### 电偶极跃迁和磁偶极跃迁

以下考虑最常见的情况，微扰项为电磁场与电子的相互作用，电场为  $\mathbf{E} = -\frac{\partial \mathbf{A}}{\partial t}$ ，磁场为  $\mathbf{B} = \nabla \times \mathbf{A}$ 。利用最小耦合引入电磁场作用  $\mathbf{p} \rightarrow \mathbf{p} - \frac{e}{c} \mathbf{A}$ ，哈密顿量变为

$$\begin{aligned} \hat{H}(\mathbf{r}) &= \frac{1}{2m} \left( \hat{\mathbf{p}}^2 - \frac{e}{c} \mathbf{A} \right)^2 + V(\mathbf{r}) \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + O(\mathbf{A}^2) \\ &= \hat{H}_0(\mathbf{r}) - \frac{e}{mc} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A} + O(\mathbf{A}^2), \end{aligned} \quad (5.73)$$

其中  $\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r})$ ，微扰哈密顿量为

$$\hat{H}'(\mathbf{r}) = -\frac{e}{mc} \hat{\mathbf{p}} \cdot \mathbf{A}. \quad (5.74)$$

由于  $\frac{e}{mc}$  是常数， $\mathbf{A}$  是外场，二者都在系统的变换下不变，因此  $\hat{H}'$  在对称操作下的变换形式与动量  $\hat{\mathbf{p}}$  的变换形式一致，即判断  $\langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle$  是否为零只需判断  $\langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{\mathbf{p}} | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle$  是否为零。而  $\hat{\mathbf{p}}$  也可用  $\frac{m}{i\hbar} [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0]$  代替，即

$$\begin{aligned} \langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{\mathbf{p}} | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle &= \frac{m}{i\hbar} \langle \varphi_m^{(\beta)} | [\hat{\mathbf{r}}, \hat{H}_0] | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle \\ &= \frac{m}{i\hbar} (E_\alpha - E_\beta) \langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{\mathbf{r}} | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle, \end{aligned} \quad (5.75)$$

因此动量  $\hat{\mathbf{p}}$  的变换与坐标算符  $\hat{\mathbf{r}}$  和电偶极矩算符  $\hat{\boldsymbol{\mu}} = -e\hat{\mathbf{r}}$  一致，因此这种电磁场跃迁也称为**电偶极跃迁**，此时的微扰哈密顿量  $\hat{H}'(\mathbf{r})$  是一个极矢量。若微扰哈密顿量  $\hat{H}' \propto \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$ ，则  $\hat{H}'$  按  $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$  进行变换，其中  $\mathbf{R}$  为轴矢量，此时的跃迁称为**磁偶极跃迁**。

**例 5.7.** 对于  $O_h$  群，若初态为  $T_{2g}$  表示，求分别允许电偶极跃迁和磁偶极跃迁的末态表示。

$O_h$  群显含空间反演  $I$ ，是直积群  $O_h = O \cup IO = O \otimes C_i$ ，其中  $C_i = \{e, I\}$  是由空间反演生成的二阶循环群，同构于  $C_2$ 。一般地，直积群  $G = G_R \otimes C_i$  的不可约表示可在直积因子  $G_R$  不可约表示的基础上加上空间反演操作的本征值——宇称来标记。如图5.5(a)所示，设  $G_R$  有  $r$  个不等价不可约表示，而  $C_i$  有两个不等价不可约表示（见例 5.3），对应于偶宇称（1 维恒等表示）和奇宇称（1 维非恒等表示），则直积群  $G = G_R \otimes C_i$  有  $2r$  个不等价不可约表示，如图5.5(b)所示，其中  $A_{1g}, A_{2g}, \dots, A_{rg}$  为偶宇称表示，即群元  $IC_1 = I$  的特征标为  $S_i$  ( $S_i$  为  $A_i$  的维度)；而  $A_{1u}, A_{2u}, \dots, A_{ru}$  为奇宇称表示，空间反演操作  $I$  的特征标为  $-S_i$ 。

$O$  群的特征标为 (表5.3)

$O$	$\{e\}$	$8\{C_3\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{C_2'\}$	
$A_1$	1	1	1	1	1	$x^2 + y^2 + z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	
$E$	2	-1	2	0	0	$(x^2 - y^2, 2z^2 - x^2 - y^2)$
$T_1$	3	0	-1	1	-1	$(x, y, z)$
$T_2$	3	0	-1	-1	1	$(xy, yz, xz)$

(a)

$G_R$	$\{C_1\}$	$\{C_2\}$	$\dots$	$\{C_r\}$
$A_1$	$\chi$			
$A_2$				
$\vdots$				
$A_r$				

$C_i$	$e$	$I$
$A_1(A_g)$	1	1
$A_2(A_u)$	1	-1

(b)

$G$	$\{C_1\}$	$\{C_2\}$	$\dots$	$\{C_r\}$	$\{IC_1\}$	$\{IC_2\}$	$\dots$	$\{IC_r\}$
$A_{1g}$	$\chi$				$\chi$			
$A_{2g}$								
$\vdots$								
$A_{rg}$								
$A_{1u}$	$\chi$				$-\chi$			
$A_{2u}$								
$\vdots$								
$A_{ru}$								

图 5.5: (a)  $G = G_R \otimes C_i$  中直积因子的特征标表。(b) 直积群  $G$  的特征标表。

因此  $O_h$  群的特征标为

$O_h$	$\{e\}$	$8\{C_3\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_2'\}$	$6\{C_4\}$	$\{I\}$	$8\{IC_3\}$	$3\{IC_4^2\}$	$6\{IC_2'\}$	$6\{IC_4\}$
$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$A_{2g}$	1	1	1	-1	-1	1	1	1	-1	-1
$E_g$	2	-1	2	0	0	2	-1	2	0	0
$T_{1g}$	3	0	-1	-1	1	3	0	-1	-1	1
$T_{2g}$	3	0	-1	1	-1	3	0	-1	1	-1
$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$A_{2u}$	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1	1	1
$E_u$	2	-1	2	0	0	-2	1	-2	0	0
$T_{1u}$	3	0	-1	-1	1	-3	0	1	1	-1
$T_{2u}$	3	0	-1	1	-1	-3	0	1	-1	1

若电子初态  $\varphi^{(\alpha)}$  承载  $T_{2g}$  表示 (如  $d_{xy}, d_{yz}, d_{xz}$  轨道), 电偶极矩  $\mu = e\mathbf{r}$ , 在  $O$  群中,  $\mathbf{r} = (x, y, z)$  按  $T_1$  表示进行变换, 而考虑空间反演, 有  $I: \mathbf{r} \rightarrow -\mathbf{r}$ , 因此  $\mathbf{r}$  是奇宇称表示, 则在  $O_h$  群中电偶极矩  $\mu$  按  $T_{1u}$  表示变换。电偶极跃迁矩阵元  $\langle \varphi_m^{(\beta)} | \hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle$  中,  $\hat{H}' | \varphi_n^{(\alpha)} \rangle$  按直积表示  $T_{1u} \otimes T_{2g}$  变换, 此表示可分解为

$$T_{1u} \otimes T_{2g} = A_{2u} \oplus E_u \oplus T_{1u} \oplus T_{2u},$$

若末态  $\varphi^{(\beta)}$  包含以上分解的表示, 则可以发生电偶极跃迁。显然, 若初态是偶宇称, 则允许发生电偶极跃迁的末态必为奇宇称, 因为奇宇称表示 ( $\hat{H}'$ ) 和偶宇称表示 ( $\varphi^{(\alpha)}$ ) 的直积必为奇宇称表示。

与之相应的, 初态是偶宇称, 允许发生磁偶极跃迁的末态必为偶宇称, 因为  $\hat{H}' \propto \hat{\mathbf{r}} \times \hat{\mathbf{p}}$  承载偶宇称表示。  $\hat{H}' \propto \mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$  在  $O$  群中按  $T_1$  表示变换, 但  $I: \mathbf{R} \rightarrow \mathbf{R}$ , 因此是偶宇称表示, 则在  $O_h$  群中按  $T_{1g}$  表示变换。直积表示分解为

$$T_{1g} \otimes T_{2g} = A_{2g} \oplus E_g \oplus T_{1g} \oplus T_{2g},$$

若末态  $\varphi^{(\beta)}$  包含以上分解的表示, 则可以发生磁偶极跃迁。

**例 5.8.** 若对称性从前一例的  $O_h$  群降低为  $C_{4v}$  群，则上述跃迁过程如何变化？

$C_{4v}$  的特征标表为

$C_{4v}$	$\{e\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_4\}$	$2\{\sigma_v\}$	$2\{\sigma_d\}$		
$A_1$	1	1	1	1	1	$z$	$x^2 + y^2, z^2$
$A_2$	1	1	1	-1	-1	$R_z$	
$B_1$	1	1	-1	1	-1		$x^2 - y^2$
$B_2$	1	1	-1	-1	1		$xy$
$E$	2	-2	0	0	0	$(x, y), (R_x, R_y)$	$(xz, yz)$

由对称化基函数的对应关系知  $O_h$  的  $T_{1u}$  表示分导在  $C_{4v}$  中的分导表示存在直和分解  $A_1 \oplus E$ ，对应电偶极矩  $\mu = e\mathbf{r}$  的  $z$  分量按  $A_1$  表示变换，而  $(x, y)$  分量按  $E$  表示变换。而初态的 3 维  $T_{2g}$  表示在  $C_{4v}$  的分导表示可分解为  $B_2 \oplus E$ ，分别对应  $xy$  和  $(xz, yz)$  的基函数。因此，若初态为  $B_2$  表示，则

$$(A_1 \oplus E) \otimes B_2 = B_2 \oplus E,$$

此结果意味着  $B_2$  表示的初态可被  $z$  偏振光 ( $A_1$  表示) 激发至  $B_2$  表示的末态，而可被  $(x, y)$  偏振光 ( $E$  表示) 激发至  $E$  表示的末态，即显示出对光偏振方向的选择性吸收。同理，若初态为  $E$  表示，则有

$$(A_1 \oplus E) \otimes E = E \oplus A_1 \oplus A_2 \oplus B_1 \oplus B_2,$$

可作类似的分析得到相应的选择性吸收性质。

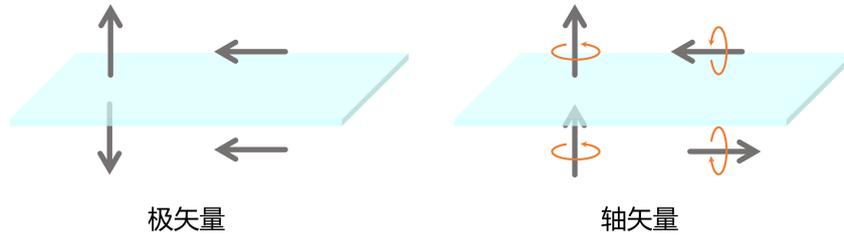


图 5.6: 极矢量和轴矢量在反射操作下的变换。

对于磁偶极跃迁，只需注意到  $O_h$  的  $T_{1g}$  表示分导至  $C_{4v}$  中的表示可分解为  $A_2 \oplus E$ ，即  $R_z$  按  $A_2$  表示变换而  $(R_x, R_y)$  按  $E$  表示变换。 $R_z$  和  $(R_x, R_y)$  承载  $C_{4v}$  不同的表示，也可从轴矢量的性质理解。如图 5.6 所示，在反射操作下，轴矢量垂直反射面的分量保持不变，而平行于反射面的分量将反号，即

$$\begin{aligned} \sigma_x &: (R_x, R_y, R_z) \rightarrow (R_x, -R_y, -R_z), \\ \sigma_y &: (R_x, R_y, R_z) \rightarrow (-R_x, R_y, -R_z), \\ \sigma_z &: (R_x, R_y, R_z) \rightarrow (-R_x, -R_y, R_z). \end{aligned}$$

因此在  $C_{4v}$  中，

$$\sigma_v R_z = \sigma_d R_z = -R_z, \quad \sigma_v (R_x, R_y) = (\pm R_x, \mp R_y)$$

其中  $\pm$  号视反射面为  $\sigma_x$  或  $\sigma_y$  而定。同时  $R_z$  在  $C_{4z}$  下不变，而  $R_x$  在  $C_{4z}$  下变为  $R_y$ ，因此  $R_z$  承载 1 维非恒等表示  $A_2$ ， $(R_x, R_y)$  承载 2 维表示  $E$ 。判断磁偶极跃迁只需分解  $(A_2 \oplus E) \otimes B_2$  和  $(A_2 \oplus E) \otimes E$  即

可, 即

$$(A_2 \oplus E) \otimes B_2 = B_1 \oplus E,$$

$$(A_2 \oplus E) \otimes E = E \oplus A_1 \oplus A_2 \oplus B_1 \oplus B_2.$$

以上的讨论只考虑了电子波函数的初末态变换, 然而在固体材料中, 外场除了能激发电子态外, 还能激发其他准粒子, 如声子、磁振子等。对于实际情况, 在具有空间反演不变性的体系, 被电偶极跃迁联系起的两个电子态有时具有相同的宇称, 这是因为跃迁过程中声子态被激发至相反宇称的末态上。因此对于一般情况, 需要考虑的跃迁矩阵元应为

$$\langle \psi'_v, \psi'_e | \hat{H}' | \psi_v, \psi_e \rangle, \quad (5.76)$$

其中  $\psi_v$  和  $\psi_e$  分别为振动态和电子态, 需要三个表示的直积分解:  $A_{H'} \otimes A_v \otimes A_e$ 。

### 振动模式

接下来以水分子的振动模式为例, 展示分子振动模式如何承载点群的不可约表示。

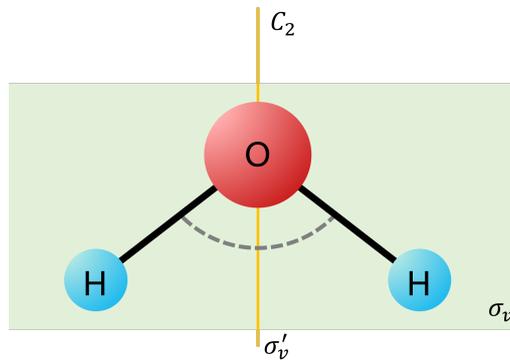


图 5.7: 水分子示意图, 点群为  $C_{2v}$ 。

水分子示意图如图5.7所示, 其点群为  $C_{2v}$ , 二次轴  $C_2$  平分两个氢氧键夹角, 反射面  $\sigma_v$  和  $\sigma'_v$  分别是水分子所处平面和氢原子-氢原子连线的垂直平分面。  $C_{2v}$  群的特征标表为

$C_{2v}$	$e$	$C_2$	$\sigma_v$	$\sigma'_v$		
$A_1$	1	1	1	1	$z$	$x^2, y^2, z^2$
$A_2$	1	1	-1	-1	$R_z$	$xy$
$B_1$	1	-1	1	-1	$R_y, x$	$xz$
$B_2$	1	-1	-1	1	$R_x, y$	$yz$

当各原子核处于平衡位置时, 三个原子核的波函数  $\psi_i$  ( $i = O, H_1, H_2$ ) 会构成  $C_{2v}$  群的一个表示, 即对任意  $g \in C_{2v}$ , 有

$$\hat{P}_g \psi_i = \sum_j A_{ji}^{a.s.}(g) \psi_j, \quad (5.77)$$

其中

$$A_{ji}^{a.s.}(g) = \langle \psi_j | \hat{P}_g | \psi_i \rangle, \quad (5.78)$$

该表示称为原子位点的自身表示 ( $a.s.$  表示 atomic site)。对于水分子, 取  $\{\psi_O, \psi_{H_1}, \psi_{H_2}\}$  为基函数, 可写出原子位点自身表示矩阵为

$$A^{a.s.}(e) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A^{a.s.}(C_2) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

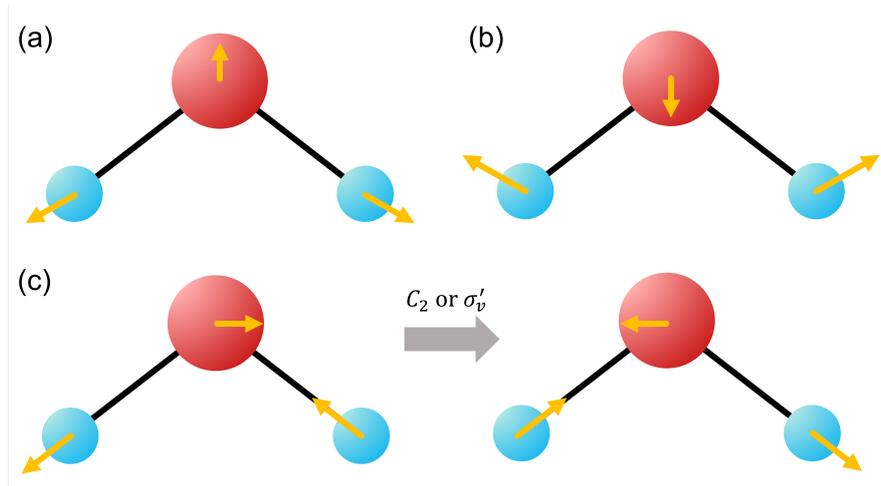


图 5.8: 水分子的三种振动模, 其中 (a) (b) 振动模式承载  $A_1$  表示, (c) 振动模式承载  $B_1$  表示。

$$A^{a.s.}(\sigma_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, \quad A^{a.s.}(\sigma'_v) = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix},$$

自身表示一般是可约表示, 对于水分子为  $A^{a.s.} = 2A_1 \oplus B_1$ 。

当考虑原子核偏离平衡位置时, 每个原子核的偏离量可用一个偏离矢量  $\mathbf{r}_i = (x_i, y_i, z_i)$  描述 ( $i = O, H_1, H_2$ ), 包含三个分量。因此, 对于三个原子构成的水分子, 一共有  $3 \times 3 = 9$  个原子运动的自由度。总的原子运动自由度可分为分子刚体运动和非刚体运动两部分, 而刚体运动部分包括分子质心平动自由度与绕质心的转动自由度, 而非刚体部分即为分子的振动自由度, 因为平动与转动部分各有 3 个自由度, 因此水分子剩余 3 个振动自由度, 对应三种振动模式。以上运动自由度的关系反映为不同运动承载表示间的关系, 即

$$A^{a.s.} \otimes A_{\mathbf{r}} = A_{trans} \oplus A_{rot} \oplus A_{vib}, \quad (5.79)$$

其中  $A_{\mathbf{r}}$  为偏离矢量承载的表示, 与位矢  $\mathbf{r}$  承载的表示一致,  $A_{trans}$  为质心平动运动承载的表示, 也与位矢  $\mathbf{r}$  承载的表示一致,  $A_{rot}$  为绕质心转动运动承载的表示, 与轴矢量  $\mathbf{R} = (R_x, R_y, R_z)$  或轨道角动量承载的表示一致,  $A_{vib}$  为振动运动承载的表示。一个有固定点群的分子, 其原子位点、偏离矢量、质心平移运动、绕质心旋转运动所承载的点群表示都是已知的, 故可用以上关系求出振动模式承载的点群表示。

水分子的点群为  $C_{2v}$ , 已求出自身表示为  $A^{a.s.} = 2A_1 \oplus B_1$ , 通过  $C_{2v}$  的特征标表可知

1. 偏离矢量的  $x, y, z$  分量分别承载  $B_1, B_2, A_1$  表示:

$$A_{\mathbf{r}} = A_1 \oplus B_1 \oplus B_2.$$

因此直积表示分解为

$$A^{a.s.} \otimes A_{\mathbf{r}} = (2A_1 \oplus B_1) \otimes (A_1 \oplus B_1 \oplus B_2) = 3A_1 \oplus 3B_1 \oplus 2B_2 \oplus A_2.$$

2. 质心平动的  $x, y, z$  分量分别承载  $B_1, B_2, A_1$  表示:

$$A_{trans} = A_1 \oplus B_1 \oplus B_2.$$

3. 绕质心转动的  $R_x, R_y, R_z$  分量分别承载  $B_2, B_1, A_2$  表示:

$$A_{rot} = A_2 \oplus B_1 \oplus B_2.$$

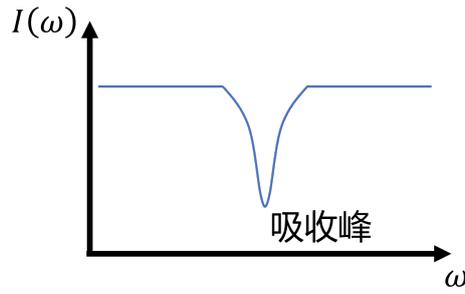


图 5.9: 红外吸收谱。

因此，分子振动承载的表示为

$$A_{vib} = 2A_1 \oplus B_1.$$

如图5.8所示，其中 (a) 和 (b) 两种模式在  $C_{2v}$  所有群元操作下都保持不变，但 (c) 模式在  $C_2$  和  $\sigma'_v$  操作下反号。具体每个原子的偏移量可使用特征标投影算符结合质心无移动条件和无绕质心转动条件得出，详情可见徐婉棠、喀兴林《群论及其在固体物理中的应用》第四章 4.7 节。

### 红外吸收谱与拉曼散射谱

如果体系存在热激发的原子振动，其振动能级的能量差 (0.025 – 1 eV) 处在红外波段 (760 nm – 1 mm)，因此当一系列连续谱的红外光入射体系时，其中特定频率的红外光将诱导体系由一个振动态跃迁到另一个振动态，反映为特定频率的红外光被吸收，如图5.9所示。若入射电磁波的电场强度为  $\mathbf{E}$ ，特定频率  $\omega$  的光子会被原子吸收而使体系原子核产生本征振动，原子核与电子的电荷中心不重合产生电偶极矩  $\boldsymbol{\mu}$ ，则电磁场与系统的相互作用的一阶效应为

$$\hat{H}'_{IR} = -\mathbf{E} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}, \quad (5.80)$$

因此需要考虑跃迁矩阵元  $\langle \psi'_v | \hat{H}'_{IR} | \psi_v \rangle$  来判断给定的初态末态间是否能发生红外吸收。一般实验上关心从基态跃迁到第一激发态对应的吸收，而振动的基态为原子处于平衡位置，因此初态承载 1 维恒等表示  $A_1$ 。相互作用哈密顿量  $\hat{H}'_{IR} = -\mathbf{E} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}$  中电场  $\mathbf{E}$  为外场，不随系统变换改变，因此  $\hat{H}'$  的对称性与电偶极矩  $\boldsymbol{\mu} = -e\mathbf{r}$  的对称性一致，即红外吸收属于电偶极跃迁，可使用电偶极跃迁的选择定则判断是否发生红外吸收。

**例 5.9.** 水分子（点群为  $C_{2v}$ ）的红外吸收。

如图5.8所示，水分子存在三种振动模式，即  $A_{vib} = 2A_1 \oplus B_1$ ，由  $C_{2v}$  的特征标表判断红外吸收矩阵元  $\langle \psi'_v | \hat{H}'_{IR} | \psi_v \rangle$ ：

1.  $z$  偏振光：  $\mu_z$  按  $A_1$  表示变换，  $A_1 \otimes A_1 = A_1$ ，即发生红外吸收时会激发  $A_1$  模式的振动；
2.  $x$  偏振光：  $\mu_x$  按  $B_1$  表示变换，  $B_1 \otimes A_1 = B_1$ ，即发生红外吸收时会激发  $B_1$  模式的振动；
3.  $y$  偏振光：  $\mu_y$  按  $B_2$  表示变换，  $B_2 \otimes A_1 = B_2$ ，即不发生红外吸收，因为水分子没有  $B_2$  模式的振动。

水分子红外吸收谱的示意图如图5.10所示。

另外，如果体系存在中心反演对称性，则承载 1 维恒等表示的初态为偶宇称，  $\hat{H}'_{IR} = -\mathbf{E} \cdot \hat{\boldsymbol{\mu}}$  为奇宇称，因此发生红外吸收的末态必须为奇宇称的态。如  $C_{2h}$  的特征标表为

$C_{2h}$	$e$	$C_2$	$\sigma_h$	$I$		
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$A_u$	1	1	-1	-1	$z$	
$B_g$	1	-1	-1	1	$R_x, R_y$	$xz, yz$
$B_u$	1	-1	1	-1	$x, y$	

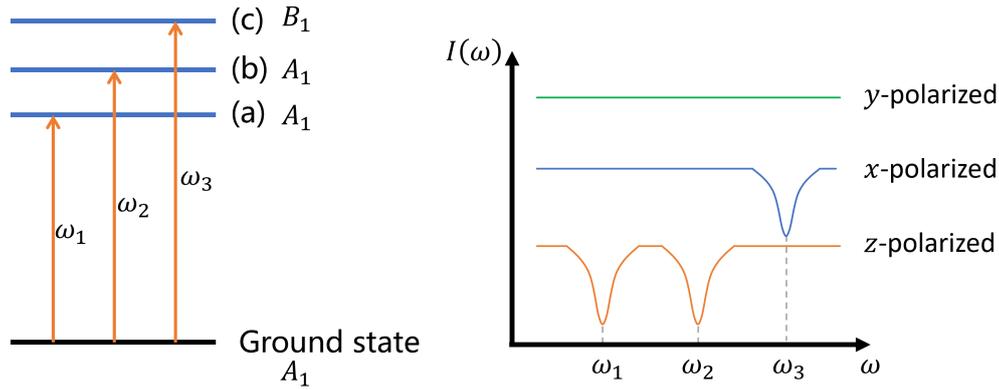


图 5.10: 水分子红外吸收谱示意图, 三种振动模式见图5.8。

初态为偶宇称态  $A_g$ ,  $\mu_z$  按  $A_u$  变换, 红外吸收激发  $A_g \otimes A_u = A_u$  模式的振动;  $\mu_x, \mu_y$  按  $B_u$  变换, 红外吸收激发  $A_g \otimes B_u$  模式的振动, 末态都为奇宇称的态。

如前文指出, 一般的电磁波吸收需要考虑跃迁矩阵元  $\langle \psi'_v, \psi'_e | \hat{H}' | \psi_v, \psi_e \rangle$ , 即需要同时考虑电磁波对电子态和振动态的激发, 但由于电子能级的能量差约为里德堡能量, 即  $1 \text{ Ry} \sim 13.6 \text{ eV} \sim 91 \text{ nm}$ , 在红外波段, 光子能量仅为  $1 \text{ meV} - 1 \text{ eV}$ , 并不足以让电子态发生跃迁, 因此只需考虑振动态的跃迁即可, 如图5.11(a)所示。当入射电磁波频率增大至处于电子能级差时 (通常为可见光波段), 若对称性允许, 体系也会吸收电磁波而产生电子-振动同步跃迁, 即图5.11(b) 最左侧的一阶光吸收效应。此时, 除了一阶光吸收效应, 还会存在二阶的光散射效应, 频率为  $\omega$  的单色光或光子照射体系 (气体分子、固体、液体等) 时会被散射, 对散射后进行光谱分析, 将发现散射光不再是单色光, 而是具有一定的频率分布, 光谱图如图5.12所示。若光子在体系中发生弹性散射, 则散射光子能量与入射光子能量相同, 为 Rayleigh 散射, 对应的跃迁过程为电子-振动基态被频率为  $\omega$  的光子激发至中间态  $|\psi_v^{int}, \psi_e^{int}\rangle$ , 中间态再自发跃迁回电子-振动基态, 因此发射出频率为  $\omega$  的光子, 如图 5.11(b) 左侧第二个过程所示, 入射光和散射光的频率相同。若光子在体系中发生非弹性散射, 则散射光子能量与入射光子能量不同, 称为拉曼 (Raman) 散射, 具体将光谱红移 (频率减小) 的谱线称为斯托克斯 (Stokes) 线, 而蓝移 (频率增大) 谱线称为反斯托克斯 (Anti-Stokes) 线, 其中红移过程为电子-振动基态吸收频率为  $\omega$  的光子而跃迁至中间态后, 中间态自发跃迁至电子基态-振动激发态 (振动频率为  $\omega_v$ ), 则发射出频率为  $\omega - \omega_v < \omega$  的光子; 蓝移过程为电子基态-振动激发态 (振动频率为  $\omega_v$ ) 吸收频率为  $\omega$  的光子而跃迁至中间态后, 中间态自发跃迁回电子-振动基态, 伴随频率为  $\omega + \omega_v > \omega$  的光子辐射, 如图5.12(b) 右侧过程所示, 因此根据峰线的频移就能得到振动频率的大小。由于频率蓝移的过程要求初态属于振动激发态, 因此发生概率更低, 表现为反斯托克斯线的强度会弱于斯托克斯线的强度。

拉曼散射谱和红外吸收谱一样, 也存在选择定则。电子-振动基态借由中间态而回到特定的电子基态-振动激发态 (电子-振动基态) 的过程, 可认为中间经历了虚激发, 虚激发并不使体系产生本征振动, 而是改变体系的极化率, 若入射频率为  $\omega$  光场, 电场强度为  $\mathbf{E}_i \cos \omega t$ , 则电偶极矩为

$$\boldsymbol{\mu} = \overleftrightarrow{\alpha} \cdot \mathbf{E}_i \cos \omega t, \quad (5.81)$$

其中  $\overleftrightarrow{\alpha}$  为二阶三维的拉曼极化率张量, 其分量为  $\alpha_{ij}$  ( $i, j = x, y, z$ )。光子的非弹性散射使得体系产生频率为  $\omega_v$  的振动, 因此极化率张量也以频率  $\omega_v$  随时间变化:

$$\overleftrightarrow{\alpha} = \overleftrightarrow{\alpha}_0 + \Delta \overleftrightarrow{\alpha}_0 \cos \omega_v t, \quad (5.82)$$

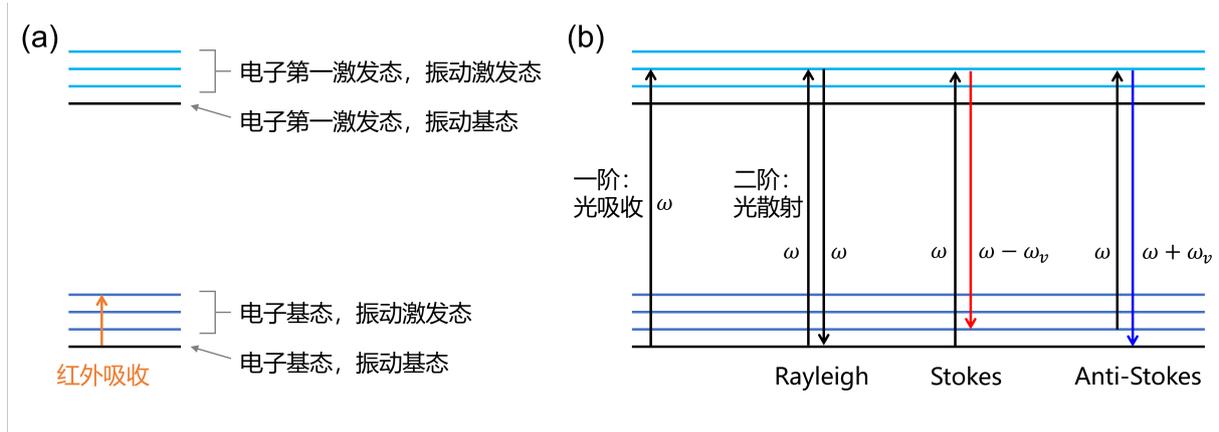


图 5.11: (a) 电子-振动能级跃迁与红外吸收。(b) 拉曼散射示意图。

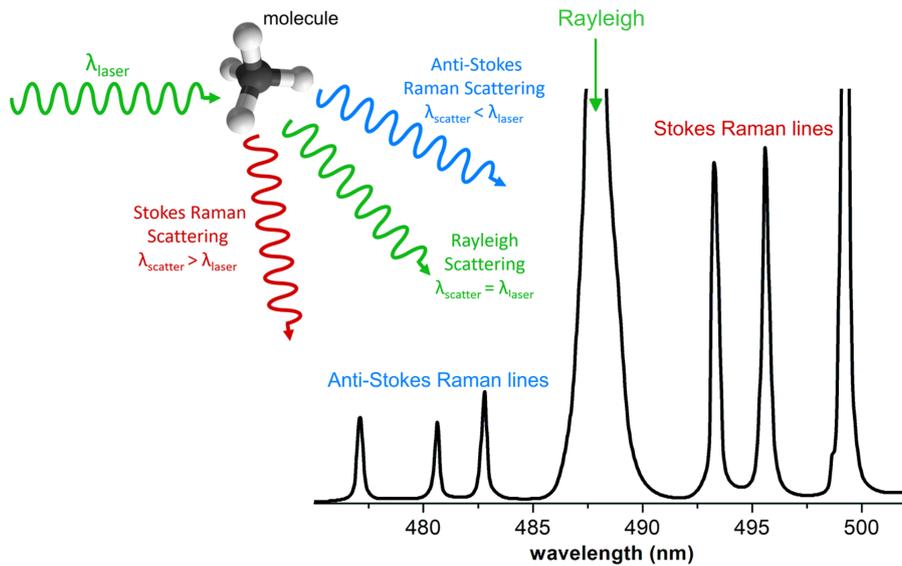


图 5.12: 拉曼散射光谱。

其中  $\overleftrightarrow{\alpha}_0$  是原子核处于平衡位置时的极化率张量。因此电偶极矩为

$$\begin{aligned} \mu &= (\overleftrightarrow{\alpha}_0 + \Delta\overleftrightarrow{\alpha}_0 \cos \omega_v t) \cdot \mathbf{E}_i \cos \omega t \\ &= \overleftrightarrow{\alpha}_0 \cdot \mathbf{E}_i \cos \omega t + \frac{\Delta\overleftrightarrow{\alpha}_0}{2} [\cos(\omega - \omega_v) t + \cos(\omega + \omega_v) t] \cdot \mathbf{E}_i, \end{aligned} \quad (5.83)$$

其中第一项频率为  $\omega$  与入射光频率相同，为 Rayleigh 散射，后两项为拉曼散射，频率为  $(\omega - \omega_v)$  和  $(\omega + \omega_v)$  的成分分别是斯托克斯和反斯托克斯频移。对于拉曼散射，相互作用的哈密顿量为

$$\hat{H}_{Raman} = -\mathbf{E}_s \cdot \Delta\mu = -\frac{1}{2} \mathbf{E}_s \cdot \Delta\overleftrightarrow{\alpha}_0 \cdot \mathbf{E}_i \cos(\omega \pm \omega_v) t, \quad (5.84)$$

其中  $\mathbf{E}_s$  为散射光的电场强度。由于电场强度不随系统变换改变， $\hat{H}_{Raman}$  的对称性依赖于二阶三维张量  $\Delta\overleftrightarrow{\alpha}_0$  的对称性，而二阶张量的变换与二次函数  $\{x^2, y^2, z^2, xy, yz, xz\}$  的变换相同，因此根据二次函数承载的表示即可判断拉曼散射跃迁矩阵元是否为零。二阶张量的变换性质见 M. S. Dresselhaus, G. Dresselhaus, & A. Jorio, *Group Theory: Application to the Physics of Condensed Matter* 第 18 章。

**例 5.10.**  $C_{2h}$  群的拉曼散射活性。

$C_{2h}$  群的特征标表为

$C_{2h}$	$e$	$C_2$	$\sigma_h$	$I$		
$A_g$	1	1	1	1	$R_z$	$x^2, y^2, z^2, xy$
$A_u$	1	1	-1	-1	$z$	
$B_g$	1	-1	-1	1	$R_x, R_y$	$xz, yz$
$B_u$	1	-1	1	-1	$x, y$	

振动基态为  $A_g$  表示, 相互作用项  $\hat{H}_{Raman}$  按二次函数变换, 承载  $A_g \oplus B_g$  表示, 都是偶宇称表示。对于斯托克斯线, 初态为  $A_g$  表示, 而  $(A_g \oplus B_g) \otimes A_g = A_g \oplus B_g$ , 因此偶宇称的表示  $A_g$  和  $B_g$  可以作为末态; 对于反斯托克斯线, 末态为  $A_g$  表示, 同理可知  $A_g$  和  $B_g$  可以作为初态。总结而言, 偶宇称的  $A_g$  和  $B_g$  表示具有拉曼活性。因为二次函数在中心反演操作下是偶函数, 所以  $\hat{H}_{Raman}$  按偶宇称表示变换, 故当存在中心反演对称性时, 红外活性和拉曼活性的态是相反的, 因此红外吸收谱和拉曼散射谱是测量振动能级的互补手段。

总结而言, 若体系有中心反演不变性, 则:

- 对于红外吸收谱,  $\hat{H}_{IR}$  按奇宇称表示变换, 激发奇宇称的态, 奇宇称态具有红外活性;
- 对于拉曼散射谱,  $\hat{H}_{Raman}$  按偶宇称表示变换, 激发偶宇称的态, 偶宇称态具有拉曼活性。

若体系无中心反演对称性, 则同一个振动态可以同时有红外活性和拉曼活性。

## 5.5 晶体平移群

本章第 1 至 4 节内容展示了群论在量子力学中的一般应用, 本节及后续部分将进一步关注于群论在周期性晶体系统中的应用, 特别是在固体物理的能带理论中的应用。在 4.4 节中, 我们将三维晶体系统无限重复的平移结构抽象为晶格, 晶格中的任意格点  $\mathbf{R}_l$  都能展开为三个晶格基矢  $\mathbf{a}_1, \mathbf{a}_2, \mathbf{a}_3$  的线性叠加:

$$\mathbf{R}_l = l_1 \mathbf{a}_1 + l_2 \mathbf{a}_2 + l_3 \mathbf{a}_3, \quad (5.85)$$

其中  $l_i$  为整数。由三个晶格基矢张成的平行六面体称为初基原胞 (Primitive cell, 简称原胞), 如图 5.13(a) 所示。由固体物理知识可知, 在存在晶体平移不变性的周期系统中, 可定义与实空间晶格相对偶的晶格, 称为倒易晶格 (reciprocal lattice), 并且可如下定义三个倒易晶格基矢量 (简称为倒格基矢):

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1), \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{\Omega} (\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2), \quad (5.86)$$

其中  $\Omega = \mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)$  为原胞体积, 故倒易晶格中的每一个格点都可表示为

$$\mathbf{K}_m = m_1 \mathbf{b}_1 + m_2 \mathbf{b}_2 + m_3 \mathbf{b}_3, \quad (5.87)$$

其中  $m_i$  亦为整数。若实空间是面心立方晶格 (fcc), 则其倒易晶格是体心立方晶格 (bcc); 若实空间是体心立方晶格, 则倒易空间是面心立方晶格。倒易晶格同样存在平移不变性, 因此也存在最小的重复单元, 但与实空间不同, 为了反映晶体的点群对称性, 在倒易空间中通常采取 Wigner-Seitz 原胞作为最小重复单元, 如图 5.13(b) 所示, 倒易空间中的 Wigner-Seitz 原胞称为第一布里渊区 (Brillouin zone)。在固体物理中, 经常使用倒易空间中的矢量, 即晶格波矢  $\mathbf{k}$  来描述波函数, 波矢  $\mathbf{k}$  可用倒格基矢展开。以下将从群论的角度理解晶体平移不变性与倒易空间及晶格波矢间的关系。在 4.4 节中, 我们知道由保持晶格对称性的转动平移算符  $\{R|\mathbf{t}\}$  组成晶体空间群, 并指出晶体空间群均存在一个不变子群, 即晶体平移群。为了实际计算方便, 通常会采用周期边界条件, 使得平移群从无限群变为有限群。

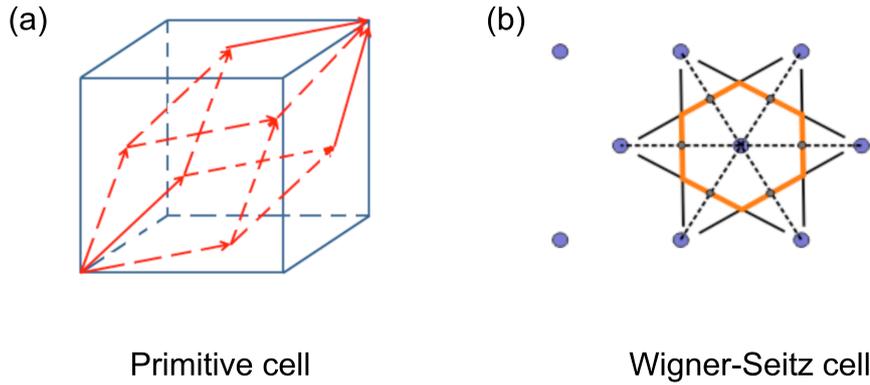


图 5.13: (a) 初基原胞和 (b) Wigner-Seitz 原胞。

**§ 定义 5.5. 晶体平移群** 对于有限晶体, 满足周期性边界条件, 取  $\{E|N_1\mathbf{a}_1\} = \{E|N_2\mathbf{a}_2\} = \{E|N_3\mathbf{a}_3\} = \{E|\mathbf{0}\}$ 。那么由元素  $\{E|\mathbf{R}_l\}$  ( $\mathbf{R}_l = l_1\mathbf{a}_1 + l_2\mathbf{a}_2 + l_3\mathbf{a}_3$ ,  $l_i = 0, 1, 2, \dots, N_i - 1$ ) 形成的集合是构成一个群, 称为晶体平移群。

平移群为 Abel 群, 共有  $N = N_1N_2N_3$  个群元, 因此也有  $N = N_1N_2N_3$  个类。Abel 群仅有 1 维不可约表示, 以下将求出一个生成元  $\{E|\mathbf{a}_1\}$  的表示。取  $g = \{E|\mathbf{a}_1\}$ , 则波函数满足

$$\begin{aligned}\hat{P}_g\psi(\mathbf{r}) &= \psi(g^{-1}\mathbf{r}) \\ &= \psi(\mathbf{r} - \mathbf{a}_1) \\ &= A(\{E|\mathbf{a}_1\})\psi(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.88)$$

其中最后一个等号利用了波函数承载 1 维不可约表示的条件。根据周期性边界条件, 应有  $A^{N_1}(\{E|\mathbf{a}_1\})\psi(\mathbf{r}) = \psi(\mathbf{r})$ , 即

$$A^{N_1}(\{E|\mathbf{a}_1\}) = 1, \Rightarrow A(\{E|\mathbf{a}_1\}) = \exp\left(\frac{2\pi i}{N_1}n_1\right), \quad (5.89)$$

其中  $n_1 = 1, 2, \dots, N_1$ 。因此, 任意晶格平移操作  $\{E|\mathbf{R}_l\} = \{E|\mathbf{a}_1\}^{l_1} \{E|\mathbf{a}_2\}^{l_2} \{E|\mathbf{a}_3\}^{l_3}$  的不可约表示为

$$A(\{E|\mathbf{R}_l\}) = \exp\left[2\pi i\left(\frac{l_1n_1}{N_1} + \frac{l_2n_2}{N_2} + \frac{l_3n_3}{N_3}\right)\right], \quad (5.90)$$

令  $\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3}\mathbf{b}_3$ , 其中  $\mathbf{b}_j$  满足  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ , 则

$$A_{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{R}_l\}) = e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}. \quad (5.91)$$

当  $n_i$  取遍  $0, 1, 2, \dots, N_i - 1$  时给出  $N_1N_2N_3$  个不等价不可约表示, 因此每个晶格波矢  $\mathbf{k}$  标记平移群的一个不等价不可约表示, 相应的基函数记为  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , 满足

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\{E|\mathbf{R}_l\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - \mathbf{R}_l) \\ &= A_{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{R}_l\})\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.92)$$

也可将以上关系写为

$$\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.93)$$

因此 Bloch 定理可由平移群的 1 维不可约表示的性质直接得到。

■ **定理 5.11. Bloch 定理** 处在晶格周期场中的本征态波函数，一定可以写成  $e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  的形式，其中  $u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  为晶格周期函数， $\mathbf{k}$  为倒空间第一布里渊区中的点（波矢）。

证明. 令  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$ , 则

$$\begin{aligned}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) &= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.94)$$

又因为  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{-i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{r}+\mathbf{R}_l)}u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l)$ , 因此

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.95)$$

即为晶格周期函数。当  $n_i$  取  $0, 1, 2, \dots, N_i - 1$  时,  $\mathbf{k} = \frac{n_1}{N_1}\mathbf{b}_1 + \frac{n_2}{N_2}\mathbf{b}_2 + \frac{n_3}{N_3}\mathbf{b}_3$  在第一布里渊区中取值。对于第一布里渊区外的波矢  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m$  ( $\mathbf{K}_m$  为倒格矢量), 波函数也承载平移群不可约表示  $A_{\mathbf{k}}$ , 因为

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\{E|\mathbf{R}_l\}}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) &= e^{i(\mathbf{k}+\mathbf{K}_m)\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}e^{i2\pi(m_1l_1+m_2l_2+m_3l_3)}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}) \\ &= A_{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{R}_l\})\psi_{\mathbf{k}+\mathbf{K}_m}(\mathbf{r}).\end{aligned}\quad (5.96)$$

□

因此, 处在晶格周期场中的激发波函数, 都能用倒空间第一布里渊区的  $\mathbf{k}$  点描述, 波函数具有相位因子乘以晶格周期函数的形式, Bloch 定理在有相互作用的系统中也成立, 因为这是晶格平移不变性决定的。

## 5.6 晶体空间群与能带

晶体平移不变性的存在使得仅需第一布里渊区的  $\mathbf{k}$  点即可完整描述平移群的信息, 实际上对于空间群, 因为还存在转动平移不变性  $\{R|\mathbf{t}\}$ , 因此只需第一布里渊区的部分  $\mathbf{k}$  点即可描述空间群的信息。若  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  承载平移群的不可约表示  $A_{\mathbf{k}}$  (简称  $\mathbf{k}$  表示), 现在考虑空间群操作  $\{R|\mathbf{t}\}$  作用后的波函数  $\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  是否还承载平移群的表示, 即需要求出  $\hat{P}_{\{E|\mathbf{R}_l\}}\left[\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})\right]$ 。空间群操作满足的乘法和求逆规律为

$$\begin{aligned}\{R_1|\mathbf{t}_1\}\{R_2|\mathbf{t}_2\} &= \{R_1R_2|R_1\mathbf{t}_2 + \mathbf{t}_1\}, \\ \{R|\mathbf{t}\}^{-1} &= \{R^{-1}| -R^{-1}\mathbf{t}\}.\end{aligned}\quad (5.97)$$

注意到对任意空间群操作都有

$$\{E|\mathbf{R}_l\}\{R|\mathbf{t}\} = \{R|\mathbf{t} + \mathbf{R}_l\} = \{R|\mathbf{t}\}\{E|R^{-1}\mathbf{R}_l\}, \quad (5.98)$$

因此有

$$\begin{aligned}\hat{P}_{\{E|\mathbf{R}_l\}}\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) &= \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\hat{P}_{\{E|R^{-1}\mathbf{R}_l\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \\ &= \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - R^{-1}\mathbf{R}_l) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot(R^{-1}\mathbf{R}_l)}\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.99)$$

其中已利用  $\psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} - R^{-1}\mathbf{R}_l)$  承载平移群 1 维不可约表示的性质。注意到对于指数函数中的内积, 有

$$\mathbf{k} \cdot (R^{-1}\mathbf{R}_l) = (R\mathbf{k}) \cdot (RR^{-1}\mathbf{R}_l) = (R\mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_l, \quad (5.100)$$

因为  $R$  是转动或转动反演操作, 是保持内积不变的变换。因此

$$\hat{P}_{\{E|\mathbf{R}_l\}} \left[ \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right] = e^{i(R\mathbf{k}) \cdot \mathbf{R}_l} \left[ \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) \right], \quad (5.101)$$

对比式 (5.92) 知  $\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  承载平移群的  $R\mathbf{k}$  表示 ( $A_{R\mathbf{k}}$ ), 也意味着若空间群存在  $\{R|\mathbf{t}\}$  操作, 则第一布里渊区中  $R\mathbf{k}$  波矢处的波函数  $\psi_{R\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  可用  $\mathbf{k}$  处的波函数表示, 即两个波函数是线性相关的

$$\psi_{R\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \lambda \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}} \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.102)$$

此关系仅与  $\{R|\mathbf{t}\}$  的转动部分相关, 与平移部分  $\mathbf{t}$  无关。此处  $\lambda$  是常数, 可归一化处理。再考虑  $\psi_{R\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  的能量, 易得

$$\begin{aligned} E_{R\mathbf{k}} &= \langle \psi_{R\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{R\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle \psi_{\mathbf{k}} | \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}^{-1} \hat{H} \hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle \psi_{\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{\mathbf{k}} \rangle \\ &= E_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (5.103)$$

已利用  $[\hat{P}_{\{R|\mathbf{t}\}}, \hat{H}] = 0$  的性质。因此当体系有  $\{R|\mathbf{t}\}$  的对称性时, 布里渊区中  $\mathbf{k}$  和  $R\mathbf{k}$  处的能量是相等的。这表明分析周期体系的能带时, 并不需要分析全布里渊区的能带信息, 而只需分析简约布里渊区中的能带即可, 布里渊区其余区域的能带可根据简约布里渊区的能带通过对称操作得到, 而这些对称操作又与空间群操作  $\{R|\mathbf{t}\}$  的平移部分无关, 因此只需空间群的点群  $G/T \cong G_0$  (定义 4.8) 即可确定简约布里渊区。空间群的点群对称性越高, 简约布里渊区越小。

**例 5.11.** 二维正方格子 (点群为  $C_4$ ) 的简约布里渊区。

二维正方格子的第一布里渊区为正方形, 而由于四重旋转对称性的存在, 可以取如图 5.14(a) 阴影部分为简约布里渊区。对于对称性较低的点群, 简约布里渊区的选取一般并不唯一, 如图 5.14(b) 是另外一种简约布里渊区的取法。

以上结果表明实空间的对称性和倒空间的对称性是一一对应的, 对于倒空间和布里渊区, 由于晶格对称性的存在, 不同的  $\mathbf{k}$  点可以有不同的对称性, 由此可定义波矢群和  $\mathbf{k}$  点小群。

**§ 定义 5.6. 波矢群** 空间群对平移群的商群  $G/T$  的群元中, 所有满足  $R\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m$  ( $\mathbf{K}_m$  为倒格矢) 的群元  $\{R|\mathbf{t}\}$  的集合组成的群称为波矢群。所有点群操作  $R$  的集合称为波矢  $\mathbf{k}$  的小群  $G_0(\mathbf{k})$  (*Little group*)。

**注.** 若两个波矢  $\mathbf{k}$  和  $\mathbf{k}'$  只相差一个倒格矢  $\mathbf{K}_m$ , 则两个波矢是等价的  $\mathbf{k}' \sim \mathbf{k}$ , 因为由式 (5.96) 知  $\mathbf{k}' = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m$  和  $\mathbf{k}$  承载平移群同一个不可约表示  $A_{\mathbf{k}}(\{E|\mathbf{R}_l\}) = e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_l}$ 。

空间群的点群  $G_0 \cong G/T$  中, 将  $\mathbf{k}$  点变换到自身 (或相差倒格矢) 的群元构成  $\mathbf{k}$  点的小群  $G_0(\mathbf{k})$ , 即  $G_0(\mathbf{k}) = \{R \in G_0 | R\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_m\}$ , 对于点群  $G_0$  中的其他操作,  $R' \in G_0$  但  $R' \notin G_0(\mathbf{k})$ ,  $R'\mathbf{k}$  将给出与  $\mathbf{k}$  点有对称性联系的其他波矢, 由此可定义波矢星。

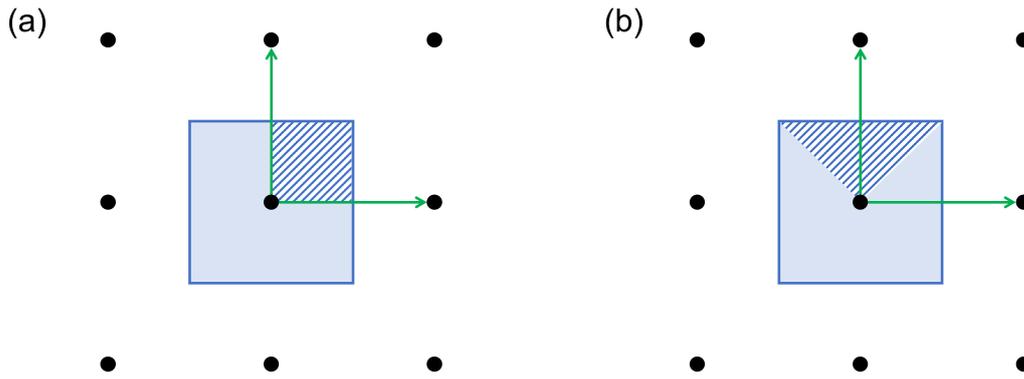


图 5.14: 二维正方格子的第一布里渊区和简约布里渊区 (阴影区域), (a) 和 (b) 为两种选取简约布里渊区的方式。

§ 定义 5.7. 波矢量 将空间群  $G$  的所有点群操作  $R$  作用在波矢  $\mathbf{k}$  上, 得到的不等价的波矢的集合称为  $\mathbf{k}$  的波矢量星。

从置换群的角度,  $\mathbf{k}$  的波矢量星实际就是  $\mathbf{k}$  的  $G_0(\mathbf{k})$  轨道 (定义 1.29)。因此根据定理 1.9 及其推论, 当点群  $G_0$  的阶为  $n$ , 小群  $G_0(\mathbf{k})$  的阶为  $m$  时,  $\mathbf{k}$  的波矢量星的个数 (或轨道数) 为  $n/m$ 。因此  $\mathbf{k}$  点的对称性越高,  $\mathbf{k}$  点小群阶数越高,  $\mathbf{k}$  的波矢量星个数越少。若  $\mathbf{k}$  点小群只有恒等操作, 则该  $\mathbf{k}$  点称为一般点, 否则称为高对称点。

例 5.12. 二维正方格子  $p4mm$  的  $\mathbf{k}$  点小群和相应的波矢量星。

设晶格常数为  $a$ , 实空间晶格基矢为  $\mathbf{a}_1 = a(1, 0)$  和  $\mathbf{a}_2 = a(0, 1)$ , 根据  $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$  可求出倒格基矢为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0), \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1),$$

该空间群的第一布里渊区为正方形, 点群为  $4mm$  即  $C_{4v}$ , 包含群元  $\{e, C_4, C_4^2, C_4^3, \sigma_x, \sigma_y, \sigma_d, \sigma'_d\}$ , 其中  $\sigma_x$  和  $\sigma_y$  是过布里渊区对边中点的竖直反射面, 而  $\sigma_d$  和  $\sigma'_d$  是过布里渊区对角线的竖直反射面。如图 5.15(a) 所示, 依波矢坐标的不同可把布里渊区的  $\mathbf{k}$  点分为以下七类, 分别为  $\Gamma(0, 0)$ ,  $M(1/2, 1/2)$ ,  $X(1/2, 0)$ ,  $\Delta(u, 0)$ ,  $\Lambda(1/2, u)$ ,  $\Sigma(u, u)$ , 以及一般点  $\mathbf{k}(u, v)$ , 其中波矢  $\mathbf{k}$  按倒格矢的分数坐标标记, 如

$$M(1/2, 1/2) \equiv \frac{1}{2}\mathbf{b}_1 + \frac{1}{2}\mathbf{b}_2,$$

而  $u, v \in (0, 1/2)$ , 且  $u \neq v$ 。首先可以判断点群  $G_0$  所有操作都保持  $\Gamma(0, 0)$  不变, 因此  $G_0(\Gamma) = G_0 = C_{4v}$ , 其波矢量星只有本身。其余波矢的小群和波矢量星如下:

1. 一般点  $\mathbf{k}(u, v)$ : 仅有恒等操作保持  $\mathbf{k}$  点不变, 因此  $G_0(\mathbf{k}) = \{e\}$ ,  $\mathbf{k}$  的波矢量星个数 (轨道数) 为  $m(\mathbf{k}) = 8$ , 如图 5.15(b) 所示, 从  $\mathbf{k}_1$  出发, 有

$$e\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_1, \quad \sigma_d\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_2, \quad C_4\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_3, \quad \sigma_x\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_4,$$

$$C_4^2\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_5, \quad \sigma'_d\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_6, \quad C_4^3\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_7, \quad \sigma_y\mathbf{k}_1 = \mathbf{k}_8.$$

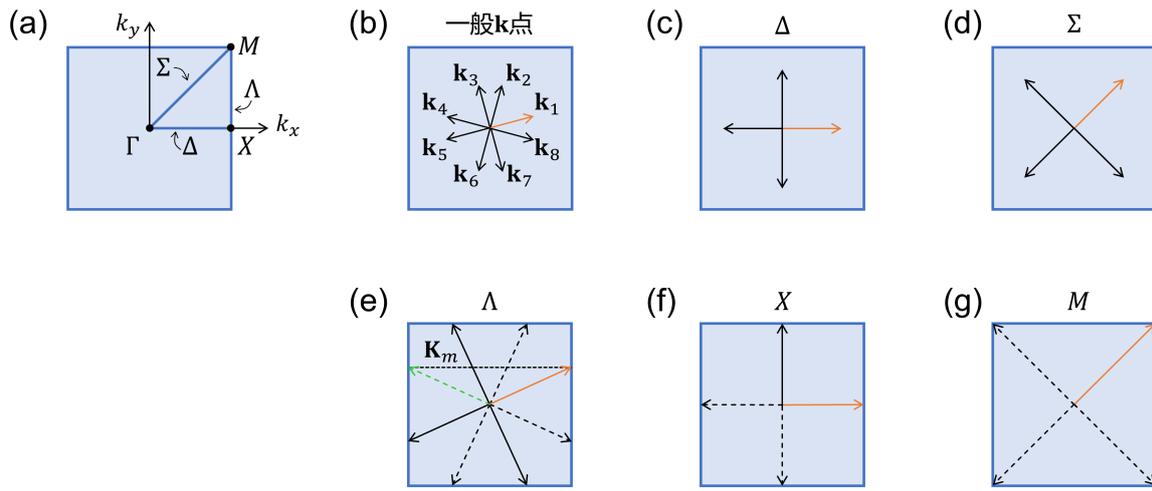


图 5.15: (a) 二维正方格子的第一布里渊区。(b) - (g) 不同  $\mathbf{k}$  点的波矢量。

2.  $\Delta(u, 0)$ : 除了恒等操作外, 过  $(u, 0)$  点的反射面也保持  $(u, 0)$  不变, 因此  $G_0(\Delta) = \{e, \sigma_y\}$ , 波矢量个数为  $m(\Delta) = |G_0|/|G_0(\Delta)| = 4$ , 如图5.15(c) 所示。
3.  $\Sigma(u, u)$ : 除了恒等操作外, 过对角线的反射面也保持该点不变, 因此  $G_0(\Sigma) = \{e, \sigma_d\}$ , 波矢量个数为  $m(\Sigma) = |G_0|/|G_0(\Sigma)| = 4$ , 如图5.15(d) 所示。
4.  $\Lambda(1/2, u)$ : 反射操作  $\sigma_x$  把  $(1/2, u)$  变换为  $(-1/2, u)$ , 与原来波矢仅相差一个倒格矢量  $(1, 0)$ , 因此  $\sigma_x$  也保持该点不变, 因此  $G_0(\Lambda) = \{e, \sigma_x\}$ , 波矢量个数为  $m(\Lambda) = |G_0|/|G_0(\Lambda)| = 4$ , 如图5.15(e) 所示。
5.  $X(1/2, 0)$ :  $G_0(X) = \{e, \sigma_x, \sigma_y, C_4^2\}$ , 波矢量个数为  $m(X) = |G_0|/|G_0(X)| = 2$ , 如图5.15(f) 所示。
6.  $M(1/2, 1/2)$ :  $G_0(M) = G_0 = C_{4v}$ , 波矢量个数为  $m(M) = |G_0|/|G_0(M)| = 1$ , 如图5.15(g) 所示。

**例 5.13.** 三维简单立方格子  $Pm\bar{3}m$  的  $\mathbf{k}$  点小群。

空间群  $Pm\bar{3}m$  的点群为  $m\bar{3}m (O_h)$ , 倒格基矢为

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}(1, 0, 0), \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{a}(0, 1, 0), \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{a}(0, 0, 1),$$

其中  $a$  为晶格常数, 第一布里渊区也为立方体。布里渊区中主要的高对称点、 $\mathbf{k}$  点小群和波矢量个数如表5.5所示。

**能带在布里渊区中的演化及相容性原理**

现在讨论晶体中电子能量随波矢  $\mathbf{k}$  的变化, 采用近自由电子近似, 认为电子在周期势  $V(\mathbf{r})$  中运动, 周期势满足空间群  $G$  的对称性, 并在平均势能  $V_0 = \lim_{L \rightarrow \infty} \frac{1}{L^3} \int_{L^3} V(\mathbf{r}) d^3\mathbf{r}$  附近涨落。假设  $V_1(\mathbf{r}) = V(\mathbf{r}) - V_0$  很小, 则可以使用微扰处理。单电子哈密顿量为

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + V_1(\mathbf{r}), \hat{H}_0(\mathbf{r}) = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 + V_0, \tag{5.104}$$

而电子的波函数由 Bloch 波函数描述, 即

$$\psi_{\mathbf{k}} = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}), u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}). \tag{5.105}$$

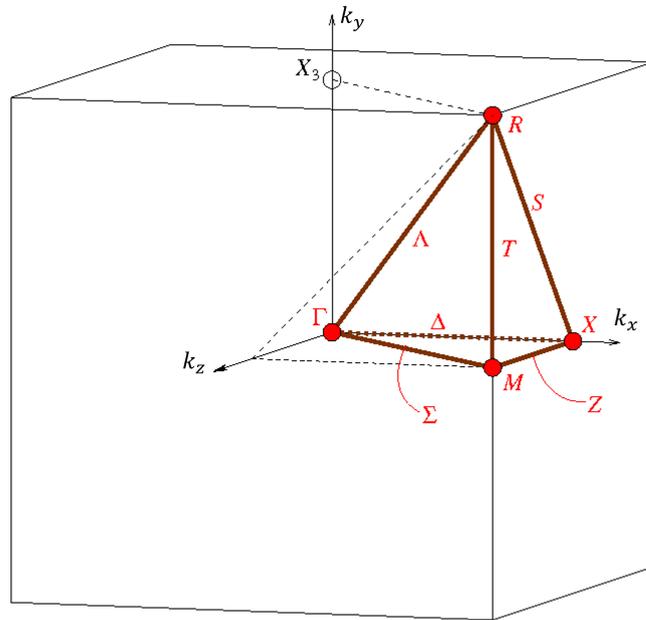


图 5.16: 简单立方晶格的第一布里渊区。

标记	坐标	小群	波矢星个数
$\Gamma$	$(0, 0, 0)$	$O_h$	1
$R$	$(1/2, 1/2, 1/2)$	$O_h$	1
$M$	$(1/2, 0, 1/2)$	$D_{4h}$	3
$X$	$(1/2, 0, 0)$	$D_{4h}$	3
$\Delta$	$(u, 0, 0)$	$C_{4v}$	6
$T$	$(1/2, u, 1/2)$	$C_{4v}$	6
$\Lambda$	$(u, u, u)$	$C_{3v}$	8
$Z$	$(1/2, 0, u)$	$C_{2v}$	12
$\Sigma$	$(u, 0, u)$	$C_{2v}$	12
$S$	$(1/2, u, u)$	$C_{2v}$	12

表 5.5: 简单立方晶格布里渊区的高对称点的小群和波矢星信息。

$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  为晶格周期函数, 可用倒格矢量展开, 即

$$u_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n u_n e^{-i\mathbf{K}_n \cdot \mathbf{r}}, \quad \psi_{\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \sum_n u_n e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}}, \quad (5.106)$$

其中  $\mathbf{K}_n = n_1 \mathbf{b}_1 + n_2 \mathbf{b}_2 + n_3 \mathbf{b}_3$ ,  $u_n$  是待定系数。式 (5.106) 表明 Bloch 波函数可用与倒格矢量  $\mathbf{K}_n$  相关的基函数  $\phi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_n}(\mathbf{r}) = e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}}$  展开, 且  $\phi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_n}$  为  $\hat{H}_0$  的本征函数, 即

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) \phi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_n}(\mathbf{r}) = E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) \phi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_n}(\mathbf{r}), \quad (5.107)$$

而零阶能量为

$$E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} (\mathbf{k} + \mathbf{K}_n)^2 + V_0. \quad (5.108)$$

以三维简单立方格子为例, 倒格矢为  $\mathbf{K}_n = \frac{2\pi}{a} (n_1, n_2, n_3)$ , 令  $\epsilon = \mathbf{k}a/2\pi$ , 则  $E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k})$  进一步表示为

$$E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k}) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 \left[ (\epsilon_1 + n_1)^2 + (\epsilon_2 + n_2)^2 + (\epsilon_3 + n_3)^2 \right] + V_0. \quad (5.109)$$

由于  $V_0$  仅提供一个固定能量, 不影响对称性的讨论, 以下取  $V_0$  为能量零点。

I.  $\Gamma$ 点,  $\mathbf{k} = 0$ ,  $\epsilon_1 = \epsilon_2 = \epsilon_3 = 0$ , 小群  $O_h$

能量为

$$E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k} = 0) = \frac{\hbar^2}{2m} \left( \frac{2\pi}{a} \right)^2 (n_1^2 + n_2^2 + n_3^2). \quad (5.110)$$

1. 基态: 当  $n_1 = n_2 = n_3 = 0$  时,  $E_{\mathbf{K}_n}(\mathbf{k} = 0)$  取基态能量零 ( $V_0$ ), 此时基态不简并, 对应的波函数为  $\psi_{\mathbf{k}=0}(\mathbf{r}) = 1$ , 承载  $O_h$  的 1 维恒等表示。
2. 第一激发态: 对应于  $n_1^2 + n_2^2 + n_3^2 = 1$ ,  $(n_1, n_2, n_3)$  的取值存在六种情况:

$$(\pm 1, 0, 0), (0, \pm 1, 0), (0, 0, \pm 1),$$

因此第一激发态是六重简并态, 波函数形成 6 维表示空间, 由于  $O_h$  不存在 6 维不可约表示, 该六重简并是偶然简并。这六个基函数为

$$\left\{ e^{i\frac{2\pi}{a}x}, e^{i\frac{2\pi}{a}y}, e^{i\frac{2\pi}{a}z}, e^{-i\frac{2\pi}{a}x}, e^{-i\frac{2\pi}{a}y}, e^{-i\frac{2\pi}{a}z} \right\}. \quad (5.111)$$

为了求出六个基函数承载的不可约表示, 需要将  $O_h$  群的群元作用在基函数上, 只需观察群元对  $\{x, y, z\}$  的变换即可, 即

$$\begin{aligned} e : \{x, y, z\} &\rightarrow \{x, y, z\} \\ 3C_4^2 : \{x, y, z\} &\rightarrow \{-x, -y, z\}, \{-x, y, -z\}, \{x, -y, -z\} \\ 6C_4 : \{x, y, z\} &\rightarrow \{y, -x, z\}, \{-y, x, z\}, \{x, -z, y\} \\ &\quad \{x, z, -y\}, \{z, y, -x\}, \{-z, y, x\} \\ 8C_3 : \{x, y, z\} &\rightarrow \{y, z, x\}, \{y, -z, -x\}, \{-y, z, -x\} \\ &\quad \{-y, -z, x\}, \{z, x, y\}, \{z, -x, -y\} \\ &\quad \{-z, x, -y\}, \{-z, -x, y\} \\ 6C_2 : \{x, y, z\} &\rightarrow \{y, x, -z\}, \{-y, -x, -z\}, \{-x, -z, -y\} \\ &\quad \{-x, z, y\}, \{-z, -y, -x\}, \{z, -y, x\} \\ I : \{x, y, z\} &\rightarrow \{-x, -y, -z\} \\ 3IC_4^2 : \{x, y, z\} &\rightarrow \{x, y, -z\}, \{x, -y, z\}, \{-x, y, z\} \\ &\vdots \end{aligned}$$

	$O_h$	$\{e\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$8\{C_3\}$	$6\{C_2'\}$	$\{I\}$	$3\{IC_4^2\}$	$6\{IC_4\}$	$8\{IC_3\}$	$6\{IC_2'\}$
$\Gamma_1^+$	$A_{1g}$	1	1	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2^+$	$A_{2g}$	1	1	-1	1	-1	1	1	-1	1	-1
$\Gamma_{12}^+$	$E_g$	2	2	0	-1	0	2	2	0	-1	0
$\Gamma_{15}^+$	$T_{1g}$	3	-1	1	0	-1	3	-1	1	0	-1
$\Gamma_{25}^+$	$T_{2g}$	3	-1	-1	0	1	3	-1	-1	0	1
$\Gamma_1^-$	$A_{1u}$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1	-1	-1
$\Gamma_2^-$	$A_{2u}$	1	1	-1	1	-1	-1	-1	1	-1	1
$\Gamma_{12}^-$	$E_u$	2	2	0	-1	0	-2	-2	0	1	0
$\Gamma_{15}^-$	$T_{1u}$	3	-1	1	0	-1	-3	1	-1	0	1
$\Gamma_{25}^-$	$T_{2u}$	3	-1	-1	0	1	-3	1	1	0	-1

表 5.6:  $O_h$  群的特征标表, 第一列的不可约表示记号采用 Wigner 标记。

而求特征标, 只需计算在群元操作后不变的基函数个数即可, 如对于  $e$ , 六个基函数都不变,  $\chi(e) = 6$ ; 对于  $C_4^2$ , 有两个基函数不变 (如  $e^{i\frac{2\pi}{a}z}$  和  $e^{-i\frac{2\pi}{a}z}$ ), 因此  $\chi(C_4^2) = 2$ 。以此类推, 写出  $O_h$  群 10 个类的特征标为

$g$	$\{e\}$	$3\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$8\{C_3\}$	$6\{C_2'\}$	$\{I\}$	$3\{IC_4^2\}$	$6\{IC_4\}$	$8\{IC_3\}$	$6\{IC_2'\}$
$\chi(g)$	6	2	2	0	0	0	4	0	0	2

对比  $O_h$  群的特征标表 (表 5.6), 可知该 6 维表示约化为  $A_{1g} \oplus E_g \oplus T_{1u}$ 。在能带表示中, 通常会使用波矢的标记加上特定序号描述该小群的不可约表示, 这是 Wigner 引入的记号, 以上的表示约化也记为  $\Gamma_1^+ \oplus \Gamma_{12}^+ \oplus \Gamma_{15}^-$ 。因此该偶然简并在周期性晶格势能下劈裂为 1 + 2 + 3 重简并的能带。

利用特征标投影算符可求出对称化基函数。对于不可约表示  $\Gamma_1^+$ , 构造特征标投影算符为

$$\hat{P}^{\Gamma_1^+} = \frac{1}{48} \sum_g \chi^{\Gamma_1^+}(g) \hat{P}_g, \quad (5.112)$$

方便起见, 将基函数简记为

$$\begin{aligned} (100) &\equiv e^{i\frac{2\pi}{a}x}, (010) \equiv e^{i\frac{2\pi}{a}y}, (001) \equiv e^{i\frac{2\pi}{a}z}, \\ (\bar{1}00) &\equiv e^{-i\frac{2\pi}{a}x}, (0\bar{1}0) \equiv e^{-i\frac{2\pi}{a}y}, (00\bar{1}) \equiv e^{-i\frac{2\pi}{a}z}. \end{aligned}$$

$O_h$  群群元对第一个基函数的变换为

$g$	$e$	$3C_4^2$	$6C_4$	$6C_2'$	$8C_3$
$\hat{P}_g(100)$	(100)	( $\bar{1}00$ ), ( $\bar{1}00$ ), (100)	(010), (0 $\bar{1}0$ ), (100) (100), (001), (00 $\bar{1}$ )	(010), (0 $\bar{1}0$ ), ( $\bar{1}00$ ) ( $\bar{1}00$ ), (00 $\bar{1}$ ), (001)	(010), (010), (0 $\bar{1}0$ ) (0 $\bar{1}0$ ), (001), (001) (00 $\bar{1}$ ), (00 $\bar{1}$ )
$g$	$I$	$3IC_4^2$	$6IC_4$	$6IC_2'$	$8IC_3$
$\hat{P}_g(100)$	( $\bar{1}00$ )	(100), (100), ( $\bar{1}00$ )	(0 $\bar{1}0$ ), (010), ( $\bar{1}00$ ) ( $\bar{1}00$ ), (00 $\bar{1}$ ), (001)	(0 $\bar{1}0$ ), (010), (100) (100), (001), (00 $\bar{1}$ )	(0 $\bar{1}0$ ), (0 $\bar{1}0$ ), (010) (010), (00 $\bar{1}$ ), (00 $\bar{1}$ ) (001), (001)

以  $3C_4^2$  为例, 三个二阶转动分别将  $\{x, y, z\}$  变换为  $\{-x, -y, z\}, \{-x, y, -z\}, \{x, -y, -z\}$ , 即分别将  $(100) \equiv e^{i\frac{2\pi}{a}x}$  变换为  $e^{-i\frac{2\pi}{a}x} \equiv (\bar{1}00), e^{-i\frac{2\pi}{a}x} \equiv (\bar{1}00), e^{i\frac{2\pi}{a}x} \equiv (100)$ 。因此有

$$\begin{aligned}\hat{P}^{\Gamma_1^+}(100) &= \frac{1}{6} [(100) + (\bar{1}00) + (010) + (0\bar{1}0) + (001) + (00\bar{1})] \\ &\propto \cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) + \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \\ &\sim 1, x^2 + y^2 + z^2, \dots\end{aligned}$$

即 1 和  $x^2 + y^2 + z^2$  等函数为承载  $\Gamma_1$  表示的对称化基函数。同理对于  $\Gamma_{15}^-$  表示, 可以求得

$$\begin{aligned}\hat{P}^{\Gamma_{15}^-}(100) &\propto (100) - (\bar{1}00) \propto \sin\left(\frac{2\pi}{a}x\right) \sim x, \\ \hat{P}^{\Gamma_{15}^-}(010) &\propto (010) - (0\bar{1}0) \propto \sin\left(\frac{2\pi}{a}y\right) \sim y, \\ \hat{P}^{\Gamma_{15}^-}(001) &\propto (001) - (00\bar{1}) \propto \sin\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sim z,\end{aligned}$$

而  $\Gamma_{12}^+$  的基函数为

$$2\cos\left(\frac{2\pi}{a}x\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sim 2x^2 - y^2 - z^2, \quad \cos\left(\frac{2\pi}{a}y\right) - \cos\left(\frac{2\pi}{a}z\right) \sim y^2 - z^2.$$

## II. $\Gamma - \Delta - X$ 高对称线

由表 5.5 知  $\Delta$  线的  $\mathbf{k}$  点小群为  $C_{4v}$ , 特征标表如表 5.7 所示。当波矢  $\mathbf{k}$  从  $\Gamma(0, 0, 0)$  到  $\Delta(u, 0, 0)$  上时, 小群从  $O_h$  变为其子群  $C_{4v}$ , 因此  $\Gamma$  点的三个表示  $\Gamma_1^+, \Gamma_{12}^+, \Gamma_{15}^-$  将变为  $C_{4v}$  上的分导表示。三个分导表示的特征标为

	$\{e\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_4\}$	$2\{IC_4^2\}$	$2\{IC_2'\}$
$\Gamma_1^+$	1	1	1	1	1
$\Gamma_{12}^+$	2	2	0	2	0
$\Gamma_{15}^-$	3	-1	1	1	1

因此三个表示在  $\Delta$  线上变为

$$\begin{aligned}\Gamma_1^+ &= \Delta_1, \\ \Gamma_{12}^+ &= \Delta_1 \oplus \Delta_2, \\ \Gamma_{15}^- &= \Delta_1 \oplus \Delta_5,\end{aligned}\tag{5.113}$$

即  $\Gamma_{12}^+$  和  $\Gamma_{15}^-$  的简并将在  $\Delta$  上劈裂。这种不同  $\mathbf{k}$  点表示的联系即相容性原理, 是在对能带进行具体计算前就能确定的。

$X(1/2, 0, 0)$  点的小群为  $D_{4h}$ , 能量为

$$E_{\mathbf{K}_n}(X) = \frac{\hbar^2}{2m} \left(\frac{2\pi}{a}\right)^2 \left[ \left(n_1 + \frac{1}{2}\right)^2 + n_2^2 + n_3^2 \right],\tag{5.114}$$

对应的基态为  $(n_1, n_2, n_3)$  取  $(0, 0, 0)$  或  $(-1, 0, 0)$ , 为二重简并态, 相应的基函数  $\phi_{\mathbf{k}, \mathbf{K}_n}(\mathbf{r}) = e^{-i(\mathbf{k} + \mathbf{K}_n) \cdot \mathbf{r}}$  为

$$\left\{ \phi_{X, \mathbf{K}_n=(0,0,0)}(\mathbf{r}) = e^{-i\frac{\pi}{a}x}, \phi_{X, \mathbf{K}_n=(-1,0,0)}(\mathbf{r}) = e^{i\frac{\pi}{a}x} \right\},\tag{5.115}$$

	$C_{4v}$	$\{e\}$	$\{C_4^2\}$	$2\{C_4\}$	$2\{IC_4^2\}$	$2\{IC_2'\}$
$\Delta_1$	$A_1$	1	1	1	1	1
$\Delta_1'$	$A_2$	1	1	1	-1	-1
$\Delta_2$	$B_1$	1	1	-1	1	-1
$\Delta_2'$	$B_2$	1	1	-1	-1	1
$\Delta_5$	$E$	2	-2	0	0	0

表 5.7:  $C_{4v}$  群的特征标表, 第一列的不可约表示记号采用 Wigner 标记。

或者将之记为  $(\frac{1}{2}00)$  和  $(\frac{\bar{1}}{2}00)$ 。根据相同的过程发现以上 2 维表示是  $X_1^+$  和  $X_4^-$ , 相应的基函数为

$$X_1^+ : \left(\frac{1}{2}00\right) + \left(\frac{\bar{1}}{2}00\right) \sim 2 \cos\left(\frac{\pi}{a}x\right),$$

$$X_4^- : \left(\frac{1}{2}00\right) - \left(\frac{\bar{1}}{2}00\right) \sim 2 \sin\left(\frac{\pi}{a}x\right).$$

相容性原理保证的能带表示连接如图所示。

## 5.7 双群与旋量波函数

到目前为止, 本章介绍的内容都是针对粒子自旋为零, 或体系的哈密顿量不显含自旋的情况, 此时波函数在空间转动变换下承载 SO(3) 群或其有限子群即点群的表示。然而对于电子等自旋半奇数的体系, 如自旋 1/2 体系, 其波函数并不承载 SO(3) 群的表示, 因为自旋在绕轴旋转  $2\pi$  后存在  $-1$  的因子, 这种性质无法被 SO(3) 群描述。实际上, 自旋 1/2 体系的波函数在空间转动变换下承载 SU(2) 群的  $j = 1/2$  不可约表示。以下先简单回顾 SO(3) 群与 SU(2) 群的不可约表示间的关系。

**定理 3.3** 已证明 SO(3) 的覆盖群是单连通的 SU(2), 同态对应关系为 1:2, 即 SU(2) 中的  $u$  和  $-u$  都对应于 SO(3) 中的  $R_u$ , 对应关系借助泡利矩阵给出, 即

$$u(\mathbf{r} \cdot \boldsymbol{\sigma}) u^{-1} = \mathbf{r}' \cdot \boldsymbol{\sigma} = (R_u \mathbf{r}) \cdot \boldsymbol{\sigma}. \quad (5.116)$$

SU(2) 所有不可约表示  $A^j(u)$  用  $j$  描述,  $j$  可取所有非负整数和半奇数  $j = 0, 1/2, 1, 3/2, \dots$ , 并且具有关系

$$A^j(-u) = (-1)^{2j} A^j(u). \quad (5.117)$$

若以欧拉角表示 SO(3) 和 SU(2) 中的群元, 当  $j$  取整数时,  $A^j(-u) = A^j(u)$ , 虽然 SO(3) 中的  $R_u(\alpha, \beta, \gamma)$  同时对应 SU(2) 中的两个矩阵  $\pm u(\alpha, \beta, \gamma)$ , 但只对应一个表示矩阵  $A^j(\alpha, \beta, \gamma)$ ; 当  $j$  取半奇数时,  $A^j(-u) = -A^j(u)$ , 所以 SO(3) 中的  $R_u(\alpha, \beta, \gamma)$  同时对应两个表示矩阵  $\pm A^j(\alpha, \beta, \gamma)$ , 此时  $A^j$  称为 SO(3) 的双值表示。双值表示有时会带来不便, 如当  $j$  取半奇数时, SO(3) 群的任意两个群元  $R_1$  和  $R_2$  乘积的表示矩阵会出现符号不确定的问题, 即

$$A^j(R_1) A^j(R_2) = \pm A^j(R_1 R_2). \quad (5.118)$$

出现这个问题的原因是 SU(2) 与 SO(3) 间的同态关系是 2:1 的, 在 SU(2) 中,  $u$  和  $-u$  通过绕任意轴旋转  $2\pi$  联系,  $u$  表示为

$$u(\alpha, \beta, \gamma) = \begin{pmatrix} \cos \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha+\gamma)/2} & -\sin \frac{\beta}{2} e^{-i(\alpha-\gamma)/2} \\ \sin \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha-\gamma)/2} & \cos \frac{\beta}{2} e^{i(\alpha+\gamma)/2} \end{pmatrix}, \quad (5.119)$$

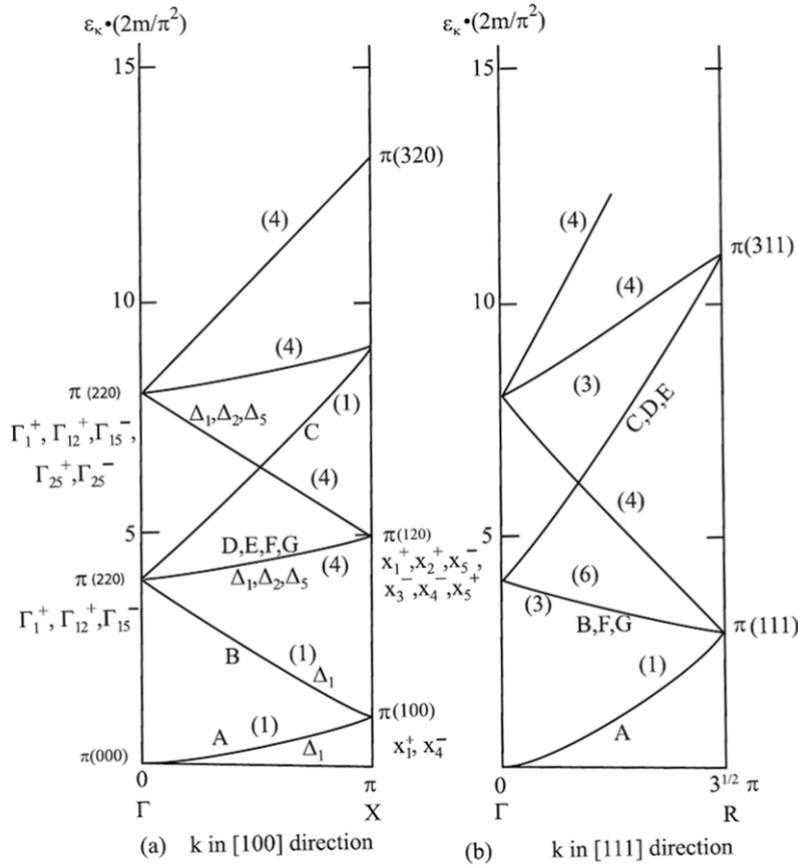


图 5.17: 空间群  $Pm\bar{3}m$  的能带表示中的相容性原理。

对于绕特定轴旋转  $2\pi$ , 即  $u(\alpha, \beta, \gamma) \rightarrow u(\alpha + 2\pi, \beta, \gamma) = -u(\alpha, \beta, \gamma)$ , 对绕其他轴旋转  $2\pi$  也具有相同的效果。然而在  $SO(3)$  中,  $R_u(\alpha, \beta, \gamma) \rightarrow R_u(\alpha + 2\pi, \beta, \gamma) = R_u(\alpha, \beta, \gamma)$ , 即转动  $2\pi$  后会回到群元本身。

为了避免双值表示的符号问题, 可将  $SO(3)$  的群元数扩大一倍, 使每一个  $R_u(\alpha, \beta, \gamma)$  只与一个二阶矩阵  $u(\alpha, \beta, \gamma)$  对应。当认为  $R_u(\alpha, \beta, \gamma)$  和  $R_u(\alpha + 2\pi, \beta, \gamma)$  是两个不同的元素时, 一个转动操作就只与一个二阶矩阵  $u$  对应。具体的做法为:

1. 定义新的元素为  $\bar{E}$  表示绕任意轴转动  $2\pi$  角的变换, 单位元则为绕任意轴转动  $4\pi$  角的变换, 即  $\bar{E}\bar{E} = E$ 。
2. 将  $SO(3)$  群的每一个元素  $g$  都与  $\bar{E}$  相乘, 得到额外的新群元  $g\bar{E}$ ;
3. 将新群元与  $SO(3)$  原有的群元放在一起, 组成一个新的群, 该群称为  $SO(3)$  群的双群, 记为  $SO^D(3)$ 。

双群  $SO^D(3)$  的群元数目是  $SO(3)$  的两倍, 它与  $SU(2)$  同构。因此, 不论  $j$  取非负整数还是半奇数,  $A^j(\alpha, \beta, \gamma)$  都是双群  $SO^D(3)$  的单值表示。需要注意, 虽然双群  $SO^D(3)$  包含了  $SO(3)$  的所有群元, 但  $SO(3)$  不是  $SO^D(3)$  的子群, 因为在  $SO^D(3)$  的乘法定义下,  $SO(3)$  所有群元的集并不具有封闭性。

双群可以描述狄拉克电子的转动对称性。不考虑相对论效应下, 电子的哈密顿量为

$$\hat{H}_0(\mathbf{r}) = \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}), \tag{5.120}$$

其中  $V(\mathbf{r})$  为中心势场, 哈密顿量的本征函数构成  $SO(3)$  群的不可约表示, 即  $\psi(\mathbf{r})$  为  $SO(3)$  群的  $A^\ell$  表示的基函数 ( $m = -\ell, -\ell + 1, \dots, \ell - 1, \ell$ ), 而  $\ell$  只能取非负整数, 对应于轨道角动量  $\hat{\mathbf{L}}$  的好量子数。实际上由于相对论效应, 电子存在自旋这一内禀自由度, 哈密顿量中将包含自旋-轨道相互作用项, 即

$$\hat{H}(\mathbf{r}) = \hat{H}_0(\mathbf{r}) + \lambda(\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{S}}, \tag{5.121}$$

其中  $\hat{\mathbf{S}} = \frac{\hbar}{2}\hat{\boldsymbol{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z)$  为自旋角动量算符。系统的总角动量为轨道角动量  $\hat{\mathbf{L}}$  和自旋角动量  $\hat{\mathbf{S}}$  的矢量和，即

$$\hat{\mathbf{J}} = \hat{\mathbf{L}} + \hat{\mathbf{S}}. \quad (5.122)$$

$\hat{\mathbf{J}}^2$  与  $\hat{J}_z$  有共同的本征函数  $\psi_{jm}$

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{J}}^2\psi_{jm} &= j(j+1)\hbar^2\psi_{jm}, \\ \hat{J}_z\psi_{jm} &= m\hbar\psi_{jm}. \end{aligned} \quad (5.123)$$

$j$  可取  $1/2, 3/2, \dots$ ,  $m = -j, -j+1, \dots, j-1, j$ 。当取定一个特定轴，如  $z$  轴时，电子的本征函数是一个二分量的旋量波函数，即

$$\psi_{jm}(\mathbf{r}) = \begin{pmatrix} \psi_{jm}(\mathbf{r}, \uparrow) \\ \psi_{jm}(\mathbf{r}, \downarrow) \end{pmatrix}, \quad (5.124)$$

其中  $\psi_{jm}(\mathbf{r}, \uparrow/\downarrow)$  表示该本征态自旋在  $z$  轴投影为  $\pm\hbar/2$  的空间部分。对于旋量波函数，绕  $z$  轴的转动将由  $\hat{P}_{\hat{z}, \alpha} = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z}$  生成，则有

$$\hat{P}_{\hat{z}, \alpha}\psi_{jm}(\mathbf{r}) = e^{-\frac{i}{\hbar}\alpha\hat{J}_z}\psi_{jm}(\mathbf{r}) = e^{-i\alpha m}\psi_{jm}(\mathbf{r}). \quad (5.125)$$

因为  $j$  和  $m$  都为半奇数，当  $\alpha = 2\pi$  时，旋量波函数将给出  $-1$  的因子；仅有当  $\alpha = 4\pi$  时，旋量波函数恢复到自身。因此狄拉克电子的转动对称性需要使用双群描述。若体系没有自旋-轨道相互作用，体系的轨道角动量  $\ell$  取整数，波函数在转动  $2\pi$  后即可恢复自身，此时只需用  $\text{SO}(3)$  描述其对称性即可。

虽然上述讨论关注于中心势场的情况，但若势场从中心势场变为晶体场，以上的分析同样适用，区别仅是需要从点群  $G$  出发构造点群  $G$  的双群  $G^D$ ，称为双点群，从第一类点群出发构造的双点群都是  $\text{SO}^D(3)$  的子群，考虑中心反演元素后依照 4.3 节构造第二类点群的双群。由于双点群仍然是有限群，因此可使用所有有限群表示理论的结论，如舒尔引理、正交性定理、Burnside 定理等，最主要的差别是从点群  $G$  出发构造双点群  $G^D$  时，需要重新确定等价类。

**例 5.14.**  $D_2$  的双群  $D_2^D$  的特征标表。

$D_2$  群为  $D_2 = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}\}$ ，构造双群需要引入  $\bar{E}$ ，并且得到

$$D_2^D = \{E, C_{2x}, C_{2y}, C_{2z}, \bar{E}, \bar{E}C_{2x}, \bar{E}C_{2y}, \bar{E}C_{2z}\}.$$

由于  $C_{2x} = R(\hat{x}, \pi)$ ,  $\bar{E}C_{2x} = R(\hat{x}, 3\pi) = C_{2x}^{-1}$ ，而该二次轴又为双向轴，因此  $\{C_{2x}, \bar{E}C_{2x}\}$  为一类。因此，可得到  $D_2^D$  的等价类为

$$\{E\}, \{\bar{E}\}, \{C_{2x}, \bar{E}C_{2x}\}, \{C_{2y}, \bar{E}C_{2y}\}, \{C_{2z}, \bar{E}C_{2z}\},$$

因此有 5 个不等价不可约表示。 $D_2$  群有四个类， $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 = 4$ ，因此有四个 1 维不等价不可约表示。而双群  $D_2^D$  有五个类， $S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 + S_5^2 = 8$ ，故多出一个 2 维不可约表示  $S_5 = 2$ 。

$D_2$  群的特征标表为

$D_2$	$\{E\}$	$\{C_{2x}\}$	$\{C_{2y}\}$	$\{C_{2z}\}$
$A_1$	1	1	1	1
$A_2$	1	1	-1	-1
$A_3$	1	-1	1	-1
$A_4$	1	-1	-1	1

而  $D_2^D$  群特征标表为

$D_2^D$	$\{E\}$	$\{\bar{E}\}$	$\{C_{2x}, \bar{E}C_{2x}\}$	$\{C_{2y}, \bar{E}C_{2y}\}$	$\{C_{2z}, \bar{E}C_{2z}\}$
$A_1$	1	1	1	1	1
$A_2$	1	1	1	-1	-1
$A_3$	1	1	-1	1	-1
$A_4$	1	1	-1	-1	1
$A_5$	2	-2	0	0	0

显然,  $D_2^D$  群的前四个不可约表示为  $D_2$  已有的不可约表示, 对于这些不可约表示, 其表示矩阵满足  $A(\bar{E}g) = A(g)$ 。而对于新的 2 维表示, 可根据正交性定理求出。

但实际上, 该 2 维不可约表示是  $SO^D(3)$  中  $j = 1/2$  的不可约表示  $A^{1/2}$  在  $D_2^D$  中的分导表示。 $SO^D(3)$  中绕任意轴旋转相同角度的操作依然是同一类, 对于绕  $\hat{z}$  轴旋转  $\alpha$  角的操作, 其不可约表示的特征标依然由以下公式给出:

$$\chi^j(\alpha) = \frac{\sin(j + 1/2)\alpha}{\sin(\alpha/2)}. \quad (5.126)$$

对于  $j = 1/2$ , 可以简化为  $\chi^{1/2}(\alpha) = 2 \cos(\alpha/2)$ , 对于不同的转角为

$\alpha$	$\chi^{1/2}(\alpha)$	$\chi^{1/2}(\alpha + 2\pi)$
0	2	-2
$\pi$	0	0
$\frac{2\pi}{3}$	1	-1
$\frac{\pi}{2}$	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$
$\frac{\pi}{3}$	$\sqrt{3}$	$-\sqrt{3}$

因此分导至  $D_2^D < SO^D(3)$  中即为新的  $A_5$  表示。实际上对于任意双点群, 都存在自旋 1/2 波函数单独承载的表示。

若把自旋-轨道相互作用当作微扰效应, 其存在与否会导致哈密顿量的对称性发生改变。当系统不存在自旋-轨道相互作用时, 哈密顿量式 (5.120) 与任意自旋空间的转动操作都是对易的, 因此哈密顿算符群实际为  $G \otimes SU(2)$ , 其中  $G$  为哈密顿量空间部分的对称群, 为  $O(3)$  群或其有限子群。若考虑自旋-轨道相互作用, 则自旋空间的转动会存在约束, 因为对于哈密顿量式 (5.121), 空间部分满足的对称算符  $\hat{P}_R$  若与  $\hat{H}_0$  和  $\hat{H}$  都对易, 则需要与自旋-轨道相互作用项也对易。对于自旋-轨道耦合项, 对称变换直接作用在  $\mathbf{r}$  上, 即

$$\begin{aligned} \hat{P}_R(\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \hat{P}_R^{-1} &= (R^{-1}\nabla) V(R^{-1}\mathbf{r}) \times (R^{-1}\hat{\mathbf{p}}) \\ &= (R^{-1}\nabla) V(\mathbf{r}) \times (R^{-1}\hat{\mathbf{p}}), \end{aligned} \quad (5.127)$$

其中已利用  $V(R^{-1}\mathbf{r}) = V(\mathbf{r})$ , 即势能在空间变换下不变的性质。若自旋空间不进行相应变换, 则自旋-轨道耦合项并不与  $\hat{P}_R$  对易。因此必须有

$$\begin{aligned} \hat{P}_R[(\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{S}}] \hat{P}_R^{-1} &= [(R^{-1}\nabla) V(\mathbf{r}) \times (R^{-1}\hat{\mathbf{p}})] \cdot (R^{-1}\hat{\mathbf{S}}) \\ &= [R^{-1}(\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}})] \cdot (R^{-1}\hat{\mathbf{S}}) \\ &= (\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \hat{\mathbf{S}} \end{aligned} \quad (5.128)$$

即空间变量  $\mathbf{r}$  作变换  $\mathbf{r} \rightarrow R^{-1}\mathbf{r}$  的同时, 自旋算符也须同时变换为  $\hat{\mathbf{S}} \rightarrow R^{-1}\hat{\mathbf{S}}$ , 即自旋的转动变换与空间的转动变换是完全绑定的, 反映为哈密顿算符群需要变为直积群  $G \otimes SU(2)$  的子群, 即双点群  $G^D < G \otimes SU(2)$ 。

因此, 在直积群  $G \otimes \text{SU}(2)$  中的群表示都具有  $A^i \otimes A^{1/2}$  的形式, 其中  $A^i$  为  $G$  的  $S_i$  维不可约表示,  $A^{1/2}$  为  $\text{SU}(2)$  的自旋  $1/2$  表示, 此不可约表示的维度为  $2S_i$  (直积因子的不可约表示的直积给出直积群的所有不等价不可约表示, 见定理 2.13), 任意能量都是二重简并的 (上、下自旋)。若考虑自旋-轨道耦合效应, 则  $A^i \otimes A^{1/2}$  表示分导至子群  $G^D$  中可能变为可约表示, 此即自旋-轨道耦合作用导致的简并劈裂。比如  $\text{SO}(3) \otimes \text{SU}(2)$  群中  $p$  轨道电子 ( $\ell = 1$ ) 在考虑自旋后构成  $A^p \otimes A^{1/2}$  的 6 维不可约表示, 但考虑自旋-轨道耦合作用后, 该 6 维表示分导至双群  $\text{SO}^D(3)$  中将变为  $A^{1/2} \oplus A^{3/2}$ , 即劈裂为一个二重简并态和四重简并态, 分别对应于总角动量为  $1/2$  和  $3/2$  的电子态。

**例 5.15.**  $O$  群中  $\Gamma_{25}$  表示在考虑自旋-轨道耦合发生的能级劈裂。

$O$  群的 24 个群元分为 5 个类, 分别为

$$O : \{E\}, 6\{C_4\}, 8\{C_3\}, 3\{C_4^2\}, 6\{C_2'\},$$

加入绕任意轴转动  $2\pi$  的变换  $\bar{E}$  后, 等价类变为

$$O^D : \{E\}, \{\bar{E}\}, 6\{C_4\}, 6\{\bar{E}C_4\}, 8\{C_3\}, 8\{\bar{E}C_3\}, 6\{C_4^2\}, 12\{C_2\},$$

需要注意  $O$  群和  $O^D$  群的  $6\{C_4\}$  类是包含不同的元素的, 在  $O$  群中为  $\{C_{4x}, C_{4y}, C_{4z}, C_{4x}^3, C_{4y}^3, C_{4z}^3\}$ , 但在  $O^D$  群中为  $\{C_{4x}, C_{4y}, C_{4z}, \bar{E}C_{4x}^3, \bar{E}C_{4y}^3, \bar{E}C_{4z}^3\}$ , 这是因为在双群的乘法规律下

$$\begin{aligned} C_{4x}^8 &= C_{4x}C_{4x}^7 \\ &= C_{4x}C_{4x}^4C_{4x}^3 \\ &= C_{4x}(\bar{E}C_{4x}^3) \\ &= E, \end{aligned}$$

即

$$C_{4x}^{-1} = \bar{E}C_{4x}^3,$$

因此双向轴的要求使得  $C_{4x}$  和  $\bar{E}C_{4x}^3$  是等价元素。 $O^D$  群的 8 个不等价不可约表示的前 5 个是  $O$  群原有的空间部分的不可约表示, 而新的 3 个是考虑自旋转动后给出的额外表示, 即

$$\underbrace{S_1^2 + S_2^2 + S_3^2 + S_4^2 + S_5^2}_{\text{空间部分}} + \underbrace{S_6^2 + S_7^2 + S_8^2}_{\text{自旋部分}} = 48,$$

原有的表示维度为  $S_1 = S_2 = 1$ ,  $S_3 = 2$ ,  $S_4 = S_5 = 3$ , 而新给出的表示维度为  $S_6 = S_7 = 2$ ,  $S_8 = 4$ 。写出  $O^D$  群的特征标表如表 5.8 所示, 其中  $\Gamma_6$  为  $\text{SO}^D(3)$  中  $j = 1/2$  的不可约表示  $A^{1/2}$  在  $O^D$  中的分导表示, 即  $1/2$  自旋波函数的表示。

当不考虑自旋-轨道耦合作用时,  $O$  群的  $\Gamma_{25}$  表示在考虑自旋简并后是六重简并态, 为直积表示  $\Gamma_{25} \otimes A^{1/2}$ 。当考虑自旋-轨道耦合作用后, 上述表示分导至双群  $O^D$  中, 变为  $\Gamma_{25} \otimes \Gamma_6$ , 其特征标为

$O^D$	$\{E\}$	$\{\bar{E}\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\bar{E}C_3\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\bar{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$
$\chi^{\Gamma_{25} \otimes \Gamma_6}(g)$	6	-6	0	0	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0

可以发现该表示为可约表示, 可以分解为

$$\Gamma_{25} \otimes \Gamma_6 = \Gamma_7 \oplus \Gamma_8,$$

即六重简并态劈裂为一个二重简并的  $\Gamma_7$  表示和一个四重简并的  $\Gamma_8$  表示。这种六重简并能级在考虑自旋-轨道耦合作用后劈裂为二重简并能级和四重简并能级的情况常见于硅、锗等半导体的  $\Gamma$  点能带中, 如图 5.18 所示。

$O^D$	$\{E\}$	$\{\bar{E}\}$	$8\{C_3\}$	$8\{\bar{E}C_3\}$	$6\{C_4^2\}$	$6\{C_4\}$	$6\{\bar{E}C_4\}$	$12\{C_2\}$
$\Gamma_1$	1	1	1	1	1	1	1	1
$\Gamma_2$	1	1	1	1	1	-1	-1	-1
$\Gamma_{12}$	2	2	-1	-1	2	0	0	0
$\Gamma_{15}$	3	3	0	0	-1	1	1	-1
$\Gamma_{25}$	3	3	0	0	-1	-1	-1	1
$\Gamma_6$	2	-2	1	-1	0	$\sqrt{2}$	$-\sqrt{2}$	0
$\Gamma_7$	2	-2	1	-1	0	$-\sqrt{2}$	$\sqrt{2}$	0
$\Gamma_8$	4	-4	-1	1	0	0	0	0

表 5.8:  $O$  群的双群  $O^D$  的特征标表。

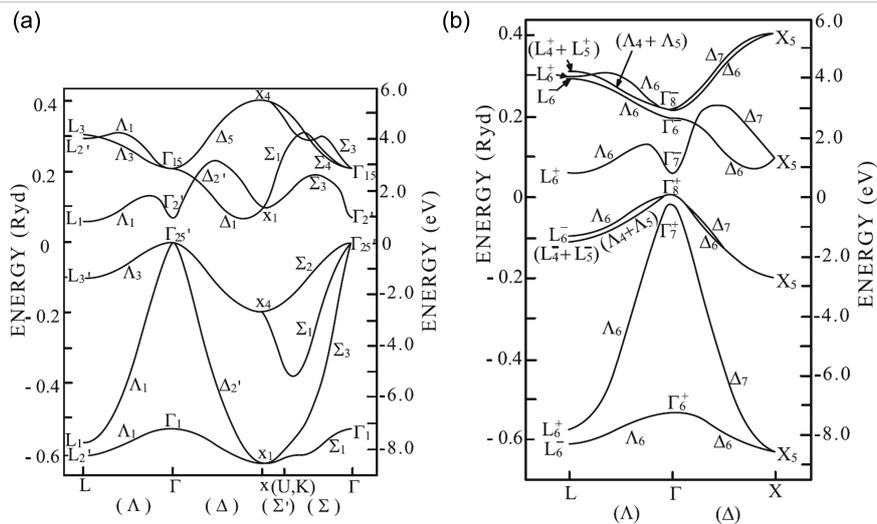


图 5.18: 铈在 (a) 不考虑自旋-轨道耦合效应和 (b) 考虑自旋-轨道耦合效应的能带图。

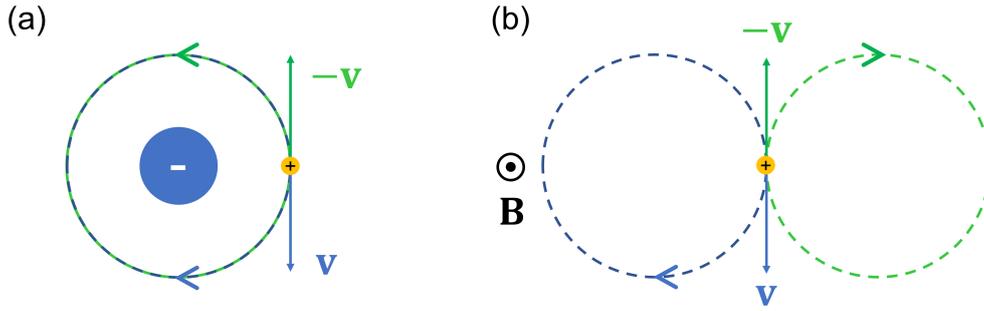


图 5.19: (a) 正电荷在负电荷提供的电场力下做圆周运动, 速度反向后轨迹重合。(b) 正电荷在磁场提供的洛伦兹力下做圆周运动, 速度反向后运动轨迹不重合。

## 5.8 时间反演不变性

之前讨论的对称性都是对空间的操作, 即点群和空间群中的操作都是对  $\mathbf{r}$  的变换, 含时演化的波函数是时空函数  $\Psi(\mathbf{r}, t)$ , 将  $\mathbf{r}$  变为  $-\mathbf{r}$  的变换为空间反演操作  $\mathcal{P}$  (前文也以  $I$  表示中心反演操作), 类似的, 可以将时间反演作为一种变换操作, 称为时间反演操作  $\mathcal{T}$ , 其效果为将  $t$  变为  $-t$ 。在经典物理中, 体系存在时间反演不变性, 则要求体系的运动轨迹在反转运动方向后完全一致。

空间反演和时间反演对不同物理量会有不同的变化。空间反演  $\mathcal{P}$  会将  $\mathbf{r}$  反号, 因此也会将包含  $\mathbf{r}$  或对  $\mathbf{r}$  的导数 (梯度) 的量反号, 即考虑一个包含体系各个物理量的函数, 在空间反演变换下会变为

$$\mathcal{P}f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{L}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{P}, \mathbf{M}, T) = f(t, -\mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}, -\mathbf{v}, \mathbf{L}, -\mathbf{F}, \boldsymbol{\tau}, -\mathbf{P}, \mathbf{M}, T), \quad (5.129)$$

其中  $t$  表示时间,  $\boldsymbol{\sigma}$  表示自旋,  $\mathbf{v} = d\mathbf{r}/dt$  表示速度,  $\mathbf{L} = \mathbf{r} \times \mathbf{v}$  表示 (轨道) 角动量,  $\mathbf{F} = -\nabla V$  为保守力,  $\boldsymbol{\tau} = \mathbf{r} \times \mathbf{F}$  为力矩,  $\mathbf{P}$  为电极化矢量,  $\mathbf{M}$  为磁矩矢量,  $T$  为温度。保守力因为包含梯度项所以在空间反演变换下反号, 而角动量和力矩是两个反号项的外积, 因此不反号。而对于空间反演变换  $\mathcal{T}$ , 以上物理量会发生如下变化

$$\mathcal{T}f(t, \mathbf{r}, \boldsymbol{\sigma}, \mathbf{v}, \mathbf{L}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{P}, \mathbf{M}, T) = f(-t, \mathbf{r}, -\boldsymbol{\sigma}, -\mathbf{v}, -\mathbf{L}, \mathbf{F}, \boldsymbol{\tau}, \mathbf{P}, -\mathbf{M}, T). \quad (5.130)$$

时间反演变换对量子力学中常用量的变换为  $t \rightarrow -t$ ,  $\mathbf{r} \rightarrow \mathbf{r}$ ,  $\mathbf{p} \rightarrow -\mathbf{p}$ , 特别会反角动量  $\mathbf{L} \rightarrow -\mathbf{L}$  和  $\boldsymbol{\sigma} \rightarrow -\boldsymbol{\sigma}$ 。若体系在时间反演变换下不变, 则称体系具有时间反演不变性。在经典力学层面, 体系在时间反演下不变, 意味着运动轨迹在时间反向流动下是重合的。如图5.19(a)所示, 正电荷粒子绕负电荷做圆周运动, 当时间反向流动下, 速度反号, 但运动轨迹是重合的, 因此该体系具有时间反演不变性。但是外磁场的加入会破坏时间反演不变性, 如图5.19(b)所示, 正电荷粒子在外磁场中受到洛伦兹力的作用  $\mathbf{F} = q\mathbf{v} \times \mathbf{B}$ , 当速度反号时, 所受洛伦兹力也反号, 因此运动轨迹与原轨迹不重合, 外磁场的加入破坏了时间反演不变性。在量子力学层面, 体系在时间反演下不变, 意味着哈密顿量与时间反演算符对易  $[\hat{\mathcal{T}}, \hat{H}(\mathbf{r})] = 0$ , 时间反演算符的形式对于无自旋体系和有自旋体系是不同的。

### 时间反演算符

含时薛定谔方程为

$$\hat{H}\Psi(\mathbf{r}, t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.131)$$

当体系具有时间反演不变性时,  $[\hat{\mathcal{T}}, \hat{H}] = 0$ , 而且  $\hat{\mathcal{T}} : t \rightarrow -t$ , 因此将  $\hat{\mathcal{T}}$  作用至式 (5.131) 有

$$\hat{H}\hat{\mathcal{T}}\Psi(\mathbf{r}, t) = \hat{H}\Psi(\mathbf{r}, -t) = -i\hbar \frac{\partial}{\partial(-t)} \Psi(\mathbf{r}, -t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi(\mathbf{r}, -t). \quad (5.132)$$

1. 当体系不含自旋时, 哈密顿量  $\hat{H}$  为实算符, 对式 (5.131) 求复共轭, 即作用复共轭算符  $\hat{K}$ , 得

$$\hat{H}\Psi^*(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (5.133)$$

对比式 (5.132) 和式 (5.133) 可发现  $\hat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, -t)$  和  $\Psi^*(\mathbf{r}, t)$  的动力学方程完全一致, 因此也具有相同的时间演化形式。因此, 时间演化算符作用于含时波函数上的效果为取复共轭操作, 即

$$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, -t) = \hat{K}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi^*(\mathbf{r}, t). \quad (5.134)$$

因此对于无自旋体系, 时间反演算符即为复共轭算符,  $\hat{T} = \hat{K}$ 。

2. 当体系含有自旋时, 如具有自旋-轨道耦合项, 即

$$\begin{aligned} \hat{H} &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) + \frac{\hbar}{4m^2c^2} (\nabla V(\mathbf{r}) \times \hat{\mathbf{p}}) \cdot \boldsymbol{\sigma} \\ &= \frac{\hat{\mathbf{p}}^2}{2m} + V(\mathbf{r}) - \frac{i\hbar^2}{4m^2c^2} (\nabla V(\mathbf{r}) \times \nabla) \cdot \boldsymbol{\sigma} \end{aligned} \quad (5.135)$$

此时的哈密顿量不是实算符, 因为虽然  $\sigma_x$  和  $\sigma_z$  都是实矩阵,  $\sigma_y$  为纯虚矩阵。此时虽然复共轭算符  $\hat{K}$  与哈密顿量不对易, 但算符  $\sigma_y \hat{K}$  与  $\hat{H}$  对易, 这只需验证

$$\begin{aligned} [\sigma_y \hat{K}, i\sigma_x] &= \sigma_y \hat{K} i\sigma_x - i\sigma_x \sigma_y \hat{K} = -i \{\sigma_x, \sigma_y\} \hat{K} = 0, \\ [\sigma_y \hat{K}, i\sigma_y] &= \sigma_y \hat{K} i\sigma_y - i\sigma_y \sigma_y \hat{K} = i\hat{K} - i\hat{K} = 0, \\ [\sigma_y \hat{K}, i\sigma_z] &= \sigma_y \hat{K} i\sigma_z - i\sigma_z \sigma_y \hat{K} = -i \{\sigma_z, \sigma_y\} \hat{K} = 0, \end{aligned} \quad (5.136)$$

其中因子  $i$  来源于式 (5.135) 中的  $\hat{\mathbf{p}} = -i\hbar\nabla$ 。因此将  $\sigma_y \hat{K}$  作用于含时薛定谔方程得

$$\hat{H}(\sigma_y \hat{K})\Psi(\mathbf{r}, t) = i\hbar \frac{\partial}{\partial t} (\sigma_y \hat{K})\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.137)$$

即对于考虑自旋的体系, 时间演化算符作用在含时旋量波函数的效果为

$$\hat{T}\Psi(\mathbf{r}, t) = \Psi(\mathbf{r}, -t) = (\sigma_y \hat{K})\Psi(\mathbf{r}, t), \quad (5.138)$$

时间反演算符为泡利算符联合复共轭算符,  $\hat{T} = \sigma_y \hat{K}$ 。

由于复共轭算符的存在, 时间反演变换为反么正 (酉) 变换 (antiunitary transformation), 即  $\langle \hat{T}\psi | \hat{T}\phi \rangle = \langle \phi | \psi \rangle = \langle \psi | \phi \rangle^*$ 。显然, 当体系不含自旋时,  $\hat{T} = \hat{K}$ , 而  $\hat{T}^2 = \hat{K}^2 = 1$ ; 当体系显含自旋自由度时,  $\hat{T} = \sigma_y \hat{K}$ ,  $\hat{T}^2 = \sigma_y \hat{K} \sigma_y \hat{K} = -1$ 。实际上, 时间反演算符可以统一写为  $\hat{T} = \hat{U} \hat{K}$  的形式, 其中  $\hat{U}$  为酉算符, 而  $\hat{K}$  为复共轭算符, 是反么正 (酉) 算符。实际上, 连续作用时间反演变换两次, 只可能得到  $\hat{T}^2 = \pm 1$ , 其中  $+1$  对应无自旋体系 (或整数自旋体系),  $-1$  对应半奇数自旋体系。 $\hat{T}^2 = \pm 1$  的证明如下: 由于连续作用两次时间反演变换需要回到原来的量子态, 因此  $\hat{T}^2 = C\hat{I}$ , 其中  $\hat{I}$  为恒等算符,  $C = e^{i\phi}$  为相位因子。利用时间反演算符的一般表达式  $\hat{T} = \hat{U} \hat{K}$  得到

$$\hat{T}^2 = \hat{U} \hat{K} \hat{U} \hat{K} = \hat{U} \hat{U}^* = C\hat{I}, \quad (5.139)$$

再利用  $\hat{U}$  是酉算符的特性, 有

$$\hat{U}^* = \hat{U}^\dagger \hat{U} \hat{U}^* = \hat{U}^\dagger C\hat{I} = C\hat{U}^\dagger, \quad (5.140)$$

取转置有

$$(\hat{U}^*)^T = \hat{U}^\dagger = (C\hat{U}^\dagger)^T = C\hat{U}^* = C(C\hat{U}^\dagger) = C^2\hat{U}^\dagger, \quad (5.141)$$

因此  $C^2 = 1$ , 故  $C = \pm 1$ , 即  $\hat{T}^2 = 1$  或  $\hat{T}^2 = -1$ 。时间反演算符的具体表达式并不唯一, 因为酉算符  $\hat{U}$  的选取不唯一, 常见的取法有  $\hat{U} = \sigma_y$  和  $\hat{U} = i\sigma_y$  等。另外也有文献将时间反演算符写为  $\hat{T} = \hat{K}\hat{U}' = \hat{U}'^*\hat{K}$  的形式, 其中  $\hat{U}'$  也是酉算符, 相当于前文定义中取  $\hat{U} = \hat{U}'^*$ 。

对于半奇数自旋体系,  $\hat{T}^2 = -1$  来源于  $SU(2)$  群  $u(\alpha + 2\pi, \beta, \gamma) = -u(\alpha, \beta, \gamma)$  的特性, 因为作用一次时间反演操作将上自旋态转为下自旋态, 再作用一次重新变为上自旋态, 故连续两次时间反演变换对应自旋空间转动  $2\pi$  的操作, 故给出  $-1$  的因子。因此, 若体系不考虑自旋-轨道耦合作用, 即可用单群描述对称性的情况下,  $\hat{T}^2 = 1$ , 对于半奇数自旋体系, 可以总结如下:

自旋-轨道耦合	对称群	$\hat{T}$	$\hat{T}^2$
无	单群 $G$	$\hat{K}$	1
有	双群 $G^D$	$\sigma_y \hat{K}$	-1

以下将分别讨论时间反演对称性对无自旋体系和半奇数自旋体系的能带的影响, 且对后者的讨论将默认考虑自旋-轨道耦合效应。

### I. 无自旋体系 (整数自旋) 时间反演对称性的影响

无自旋体系  $\hat{T} = \hat{K}$ , 时间反演对称性的存在会使得表示矩阵 (特征标) 互为复共轭的 1 维表示能量简并。假设群  $G$  具有两个 1 维不等价不可约表示  $A^\alpha$  和  $A^\beta$ , 且  $A^\alpha(g) = A^{\beta*}(g)$ , 承载  $A^\alpha$  表示的基函数  $\psi^\alpha(\mathbf{r})$ , 满足

$$\hat{P}_g \psi^\alpha(\mathbf{r}) = A^\alpha(g) \psi^\alpha(\mathbf{r}), \quad (5.142)$$

考虑  $\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r}) = \psi^{\alpha*}(\mathbf{r})$  承载的群  $G$  的表示, 以  $\hat{P}_g$  作用并注意到  $g$  为实空间的变换, 与  $\hat{T}$  可交换, 故有

$$\begin{aligned} \hat{P}_g [\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r})] &= \hat{T}\hat{P}_g \psi^\alpha(\mathbf{r}) \\ &= \hat{T}A^\alpha(g) \psi^\alpha(\mathbf{r}) \\ &= A^{\alpha*}(g) [\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r})] \\ &= A^\beta(g) [\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r})]. \end{aligned} \quad (5.143)$$

由于  $\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r}) = \psi^{\alpha*}(\mathbf{r})$  不为  $\psi^\alpha(\mathbf{r})$  本身, 因为二者承载群  $G$  不同的不可约表示, 并且

$$\langle \psi^\alpha | \hat{H} | \psi^\alpha \rangle = \langle \psi^\alpha | \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T} | \psi^\alpha \rangle, \quad (5.144)$$

即  $\psi^\alpha(\mathbf{r})$  和  $\hat{T}\psi^\alpha(\mathbf{r})$  是时间反演对称性保护的两个简并态。

**例 5.16.**  $C_4$  群在考虑时间反演对称性后的哪些不可约表示对应的本征态是简并的?

$C_4$  群存在四个不等价不可约的 1 维表示, 其中两个 1 维非恒等表示的特征标为

	$E$	$C_4$	$C_4^2$	$C_4^3$
$A_3$	1	$i$	-1	$-i$
$A_4$	1	$-i$	-1	$i$

由于  $A_3$  和  $A_4$  的特征标互为复共轭, 因此考虑时间反演对称性后, 这两个 1 维表示的本征态会成为二重简并态。一般的特征标表会把由于时间反演对称性保护的两个 1 维表示写为 2 维表示, 如表 5.9 所示。

在周期体系, Bloch 波函数满足

$$\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) = e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l} \psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.145)$$

$C_4$	$E$	$C_4$	$C_4^2$	$C_4^3$
$A_1$	1	1	1	1
$A_1$	1	-1	1	-1
$E$	1	$i$	-1	$-i$
	1	$-i$	-1	$i$

表 5.9:  $C_4$  群在考虑时间反演对称性后的特征标表。

其中  $n$  为能带指标, 时间反演变换  $\hat{T} = \hat{K}$  的作用为

$$\begin{aligned}\hat{T}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) &= \psi_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r} + \mathbf{R}_l) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\psi_{n,\mathbf{k}}^*(\mathbf{r}) \\ &= e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{R}_l}\hat{T}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}),\end{aligned}\quad (5.146)$$

因此  $\hat{T}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r})$  为承载平移群  $-\mathbf{k}$  不可约表示的 Bloch 波函数, 即

$$\hat{T}\psi_{n,\mathbf{k}}(\mathbf{r}) = \psi_{n,-\mathbf{k}}(\mathbf{r}), \quad (5.147)$$

可见晶格波矢  $\mathbf{k}$  与动量  $\mathbf{p}$  一样在时间反演变换下反号。因此, 时间反演对称性保证

$$\begin{aligned}E_{n,-\mathbf{k}} &= \langle \psi_{n,-\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{n,-\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \\ &= \langle \psi_{n,\mathbf{k}} | \hat{H} | \psi_{n,\mathbf{k}} \rangle \\ &= E_{n,\mathbf{k}},\end{aligned}\quad (5.148)$$

即 Bloch 波函数的能量关于  $\Gamma$  点是偶函数, 因此即便空间群的点群不具有中心反演对称性, 时间反演对称性的存在也使得  $\mathbf{k}$  和  $-\mathbf{k}$  处的能带是相同的。此结果不仅适用于不考虑自旋作用的电子能带, 还适用于声子能谱, 即时间反演对称性保护  $\omega_{n,\mathbf{k}} = \omega_{n,-\mathbf{k}}$ , 因为周期晶格的振动模式也具有平移不变性, Bloch 定理同样适用, 且声子是自旋零的准粒子。

## II. 自旋为半奇数体系时间反演对称性的影响

半奇数自旋体系  $\hat{T} = \sigma_y \hat{K}$ , Bloch 波函数为旋量波函数, 时间反演对称性不仅将晶格波矢反号  $\mathbf{k} \rightarrow -\mathbf{k}$ , 还会使自旋投影反号, 即

$$\hat{T}\psi_{n,\mathbf{k},\uparrow}(\mathbf{r}) = \psi_{n,-\mathbf{k},\downarrow}(\mathbf{r}), \quad (5.149)$$

因此若体系存在时间反演对称性, 则有

$$E_{n,\mathbf{k},\uparrow} = E_{n,-\mathbf{k},\downarrow}, \quad E_{n,\mathbf{k},\downarrow} = E_{n,-\mathbf{k},\uparrow}. \quad (5.150)$$

此时若体系进一步具有空间反演不变性, 则有以下定理。

**定理 5.12. 自旋简并** 在具有时间反演和空间反演的系统中 (可含自旋轨道耦合), 同一个波矢的两个不同自旋态互相简并, 即

$$E_{n,\mathbf{k},\uparrow} = E_{n,\mathbf{k},\downarrow}.$$

证明. 空间反演对称性的存在使得

$$E_{n,\mathbf{k},\uparrow} = E_{n,-\mathbf{k},\uparrow}, \quad E_{n,\mathbf{k},\downarrow} = E_{n,-\mathbf{k},\downarrow}, \quad (5.151)$$

若再结合时间反演对称性导致的能带关系式 (5.150), 则

$$E_{n,\mathbf{k},\uparrow} = E_{n,-\mathbf{k},\uparrow} = E_{n,\mathbf{k},\downarrow}, \quad (5.152)$$

即任意能带都是二重简并的, 都具有两个自旋态的成分。□

若破缺空间反演对称性, 则能带不会处处二重简并, 而是会发生自旋劈裂, 常见的自旋劈裂类型有 Rashba 自旋劈裂和 Dresselhaus 自旋劈裂两种。

对于半奇数自旋体系, 存在一个更普遍的简并, 称为 Kramers 简并。

■ **定理 5.13. Kramers 简并** 对于具有半奇数总自旋的时间反演对称系统的每个能量本征态, 存在至少一个具有相同能量的本征态。

证明. 采用反证法证明。假设本征态  $\psi$  的时间反演态  $\hat{T}\psi$  为  $\psi$  本身, 最多相差一个相位因子, 即

$$\hat{T}\psi = e^{i\theta}\psi, \quad (5.153)$$

再次作用  $\hat{T}$  有

$$\begin{aligned} \hat{T}^2\psi &= \hat{T}(e^{i\theta}\psi) \\ &= e^{-i\theta}\hat{T}\psi \\ &= e^{-i\theta}e^{i\theta}\psi \\ &= \psi, \end{aligned} \quad (5.154)$$

得出  $\hat{T}^2 = 1$ , 这与半奇数自旋体系  $\hat{T}^2 = -1$  矛盾。因此  $\hat{T}\psi$  为与  $\psi$  不同的本征态, 并且二者的能量相等, 因为

$$E' = \langle \psi | \hat{T}^\dagger \hat{H} \hat{T} | \psi \rangle = \langle \psi | \hat{H} | \psi \rangle = E.$$

□

对于整数自旋或无自旋体系,  $\hat{T}^2 = 1$ ,  $\hat{T}\psi$  与  $\psi$  可能为相同的本征态, 因此不一定是简并态。如对于一维谐振子

$$\hat{H} = \frac{\hat{p}^2}{2m} + \frac{1}{2}m\omega^2\hat{x}^2,$$

其基态波函数  $\psi_0(x)$  为实函数, 因此

$$\hat{T}\psi_0(x) = \hat{K}\psi_0(x) = \psi_0(x),$$

为  $\psi_0(x)$  本身, 因此本征能量  $E_n = (n + 1/2)\hbar\omega$  也非简并能量。实际上, 在前一部分对无自旋体系的讨论中已证明, 对于  $\hat{T}^2 = 1$  的体系, 若群  $G$  的两个 1 维表示  $A^\alpha$  和  $A^\beta$  的表示矩阵互为复共轭, 承载  $A^\alpha$  表示的  $\psi^\alpha$  才与  $\hat{T}\psi^\alpha$  简并。在此一维谐振子的例子中, 基态波函数承载 1 维恒等表示, 为实表示, 因此在时间反演对称性下不会带来新的简并度。

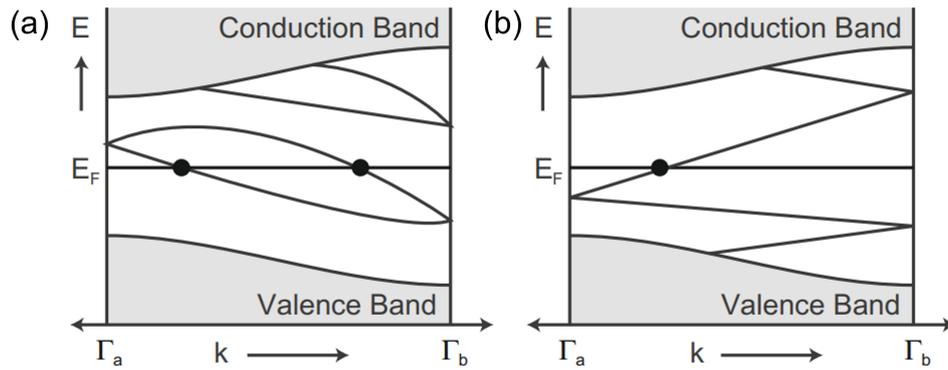


图 5.20: 表面布里渊区两个时间反演不变动量间的能带连接情况。(a) 费米能穿过偶数条表面态。(b) 费米能穿过奇数条表面态。

Kramers 简并在能带理论中体现为在时间反演不变动量 (time-reversal invariant momenta, TRIM) 处, 时间反演对称性会保持这些晶格动量处的二重简并。时间反演不变点满足

$$-\mathbf{k} = \mathbf{k} + \mathbf{K}_n, \quad (5.155)$$

其中  $\mathbf{K}_n$  为倒格矢量。不破坏时间反演对称性的微扰项不会解除这种简并。而 Kramers 简并也与时间反演对称性保护的拓扑绝缘体 (topological insulator) 直接相关。如图 5.20 所示, 绝缘体的能隙中可能存在表面态, 若存在表面态, 则 TRIM 点的二重简并确保带隙中的表面态只能有两种连接方式。第一种方式为图 5.20(a) 展示的表面态在带隙内两两相连, 此时费米能切过表面态偶数次, 这种情况下的表面态可被保持时间反演对称性的微扰项移除, 因此是平庸的表面态; 第二种方式为图 5.20(b) 展示的, 表面态在带隙内部相继相连, 费米能因而切过表面态奇数次, 此时任意保持时间反演对称性的微扰都不能移除表面态, 因此这种表面态是拓扑非平庸的。后者即为时间反演对称性保护的  $\mathbb{Z}_2$  拓扑绝缘体, 这两种情况分别对应于拓扑指标  $\mathbb{Z}_2 = 0$  和  $\mathbb{Z}_2 = 1$  的情形。