北京工业大学研究生创新教育系列著作

物理学群论基础

侯碧辉　刘凤艳　编著

科学出版社

北京工业大学研究生创新教育系列著作

物理学群论基础

侯碧辉　刘凤艳　编著

科学出版社

北　京

内 容 简 介

全书共分5章。前两章介绍抽象群的基本概念，群表示的基本理论，以及群的矩阵表示；第3章介绍群论在量子力学中的应用，特别是应用转移投影算符或特征标投影算符求出已知基函数的伴函数；第4章介绍群论在固体物理学中的应用，主要是32个晶体点群；第5章介绍原子或离子在晶场中的能级分裂，及受晶场微扰的量子态跃迁的选择定则。每章后面的习题可参考附录B的答案。

本书适合具有初步的线性代数、量子力学和固体物理学基础知识的本科生和硕士研究生使用，也适合于大学理工科各相关专业学生作为学习群论基础知识及其物理学应用的教材，并且可以作为具有同等知识水平的自学者的学习课本。

图书在版编目(CIP)数据

物理学群论基础/侯碧辉，刘凤艳编著．—北京：科学出版社，2015.9

北京工业大学研究生创新教育系列著作

ISBN 978-7-03-045873-5

Ⅰ.①物… Ⅱ.①侯…②刘… Ⅲ.①群论-应用-物理学-研究生-教材 Ⅳ.①O411.1

中国版本图书馆CIP数据核字(2015)第234499号

责任编辑：钱 俊 胡庆家／责任校对：邹慧卿

责任印制：徐晓晨／封面设计：迷底书装

科学出版社 出版

北京东黄城根北街16号

邮政编码：100717

http://www.sciencep.com

北京京华虎彩印刷有限公司 印刷

科学出版社发行 各地新华书店经销

*

2015年10月第 一 版 开本：720×1000 B5

2015年10月第一次印刷 印张：19

字数：372 000

定价：98.00元

(如有印装质量问题，我社负责调换)

前　　言

群论是数学的一个重要分支，是从整体出发研究分析一个集合的性质和特征的重要工具。群论在物理、化学等很多学科都有重要的应用。通过本书的学习，读者不仅可以领会群论在量子力学、理论力学、热力学、固体物理学等多方面的应用，而且能够从中发现事物的本质和现象作为一个综合性的整体所具有的和谐与对称之美。对事物的这种美感不仅是视觉上的，而更多的是心灵和认知上的感悟。

本书适合具有初步的线性代数、量子力学和固体物理学基础知识的本科生和硕士研究生使用，也可作为高等院校理工科相关专业学生学习群论基础知识及其物理学应用的教材，以及具有同等知识水平的自学者的学习课本。

作者曾在中国科学技术大学物理系和北京工业大学应用数理学院讲授群论课程。本书是作者基于多年的教学实践以及对一些问题的领悟，并主要参考了美国 Michael Tinkham 教授所著 *Group Theory and Quantum Mechanics* 一书的前四章编写而成。本书主要介绍群论的基本知识及其在物理学中的应用。为适应当前大部分高等院校本科生和研究生的群论课程学时较少的现状，本书讲解力求深入浅出，通俗易懂。书中把一些晶体点群作为例题来讲解，有助于读者加深理解，增强学习信心。每章后面还配有一定量的习题，附录 B 中有可供参考的习题解答，读者可以通过练习进一步巩固所学知识，并加深理解。

全书共分 5 章，第 1 章介绍群论的基本概念；第 2 章讲述群表示的基本理论，涵盖了抽象群的矩阵表示、不可约表示的基本定理；第 3 章介绍群表示理论在量子力学中的应用，特别是应用转移投影算符或特征标投影算符求出已知基函数的伴函数；第 4 章介绍群论在固体物理学中的应用，主要涉及晶体的对称性操作和 32 个晶体点群；第 5 章介绍原子或离子在晶场中的能级分裂，主要包括哈密顿算符的对称性、矩阵元定理和量子态跃迁的选择定则等内容，并介绍晶体双群的基本概念。在教学过程中，可有针对性地选择教学内容，一些内容较多的例题解答，以及 4.4 节正则变换群和 4.5 节热力学方程群，可留给学生自学。

由于知识水平和能力有限，书中难免有不妥以及疏漏之处，在此殷切希望广大读者不吝指出，以便改正。联系方式：E-mail：houbh@bjut.edu.cn. 如蒙指正，不胜感激。

侯碧辉　刘凤艳

2015 年 6 月于北京

目　　录

Contents

第1章　抽象群论

1.0 引　　言

1. 物理问题与数学工具

解决物理问题的关键是合适的数学工具。物理学研究的是天地万物的性质及其运动现象，并经思考、推演从中总结出具有哲理性的定理、法则、定律等普遍适用的规律，而进行科学的思考、推演的工具就是数学。如果不求精确的运动，一般的算术就可以解决，例如，物体运动的平均速度 V 可以由运动的距离 S 和时间 t 得出，$V=\frac{S}{t}$。如果希望了解运动的速度随时间的变化，就要用微积分方法，研究速度 $V(t)$、加速度 $a(t)$随时间 t 的变化，求解物体运动变化的规律。

而在有关原子、分子和固体问题的研究中，我们关注的是用量子理论求解不含时间的(定态)薛定谔方程：

$$\hat{H}\psi_n=E_n\psi_n \quad (n=1,2,3,\cdots)$$

从而确定本征能量 E_n 及其本征函数 ψ_n。对于孤立原子的情况，如通常量子力学教科书那样，采用微积分运算就可以解决问题。但是对于处在具有一定对称性的晶体中的原子，采用微积分运算就很难解决问题了。在这个理论研究中，本征能量具有重要地位，因为它们构成了能量守恒的孤立体系的稳定状态。光谱学的发展从实验上发现了量子化的能量本征值 E_n，于是能在此基础上推测这个体系的内部结构。同时，因为本征能量 E_n 具有简单的时间依赖关系 $\mathrm{e}^{-\mathrm{i}E_nt/h}$，它们同样可以用于讨论非稳态的时间反演过程。原子核外物理的主要理论工作也在于找出哈密顿(Hamiltonian)算符的本征函数 ψ_n 和能量本征值 E_n。

学习量子力学课程的初期，有了微积分的知识似乎就可以了。但是，在讨论量子化的哈密顿体系时，由于哈密顿体系是多体问题，粒子数目越多，或者对称性越高，问题就越复杂；要由一个已知的本征函数 ψ_i，求出与它关联的完备集的其他本征函数 ψ_j，复杂的微积分计算，令人感到十分吃力。而对于电子自旋有关的问题，要解决它也是很艰难的。我们首先要面对的是体系的哈密顿量 H，按照能量大小的顺序排列，体系的哈密顿量可表示为

$$\begin{aligned}H=&\sum_{\mathrm{el}}\frac{p_j^2}{2m}+\sum_{\mathrm{nuc}}\frac{P_K^2}{2MK}-\sum_{\mathrm{nuc\text{-}el}}\frac{Z_Ke^2}{r_{jK}}+\sum_{\mathrm{nuc}}\frac{Z_KZ_Le^2}{r_{KL}}\\&+H_{\mathrm{el}}+H_{\mathrm{so}}+H_{\mathrm{c}}+H_{\mathrm{ss}}+H_{\mathrm{hfs}}+H_{\mathrm{ext}}\end{aligned}\tag{1.1}$$

其中，前面四项分别是体系总的电子动能、体系总的原子核动能、体系总的电子与原子核之间的库仑势、体系总的原子核与原子核之间的库仑势。后面几项分别是单个自由原子的电子库仑相互作用中分立的自旋和轨道项的库仑势 H_{el}，电子的自旋-轨道耦合的能量 H_{so}，晶场的势能 H_c，自旋-自旋耦合的能量 H_{ss}，超精细结构的能量 H_{hfs}和外场的能量 H_{ext}。哈密顿量 H 的本征函数包括了所有电子和原子核的空间坐标、电子自旋和核自旋。即使像氧分子(O_2^{16})这样简单的体系，也需要求解包含自旋函数在内的几十个空间函数。除了像教科书中的谐振子、单粒子、中心场问题，以及在方势阱中的非相互作用粒子这些假设的简单情形外，几乎没有可能求解。

人们也许会提出采用高速数字计算机直接进行强力的数值计算，但要直接求解一个 $3N$ 维的波函数(如果有 N 个电子和固定的核)也是困难和繁琐的。总之，对于多体问题，微积分已不是一种合适的、得心应手的数学工具了。

所谓“工欲善其事，必先利其器”，当你学习了一些群论的知识之后，就会发现对于具有一定对称性的多体物理问题，群论是一个好的、合适的数学工具。从问题的对称性入手，不会因为对称性越高，问题越复杂、越困难。在许多情形下，群论方法是基于对事物总体对称性的考虑，能充分挖掘出体系中内含的简单性，进而可以建立一种理论，能对所考虑的体系的物理性质作出正确而合理的解释。例如，我们在第 5 章用群论方法处理问题时，是直接从对称性入手，将哈密顿量中的能量值相近的三项，即单个原子的电势能 H_{el}，电子的自旋-轨道耦合的能量 H_{so}，晶场的势能 H_c 作为微扰，而把前面能量值比较高的项定义为体系在自由空间的哈密顿量 H_0，作为研究晶场问题的起点，这样问题就迎刃而解了。

2. 对称性的作用

要将复杂问题有效地简化、归纳为可解的问题，首先就要充分利用体系所具有的对称性，以此为基础找出简化方法，并尽可能地扩展开来，最终针对问题归纳得出具有一般性和准确性的答案。为了有助于在对称性基础上对问题进行简化研究，要学习一些群论的基本知识。群论为我们提供了一种最大限度地利用对称性进行系统推导的计算方法。有了初步的群论知识，我们就能用这个简便的方法，在许多问题上引证非常普遍的结果，获得新的见解。如果没有掌握群论这个工具，许多量子力学问题几乎不可能有效地得到解决。

3. 对称性(symmetry)

物理学中有的问题存在许多很复杂的细节，但整体上的简单性给人以美感。人们对物理学的兴趣，就在于能看到、会发现、心领神会天地万物的性质和运动现象中蕴涵的美妙和神奇，并能利用这些发现创造出新的事物，使人类文明不断发展

进步。

《牛津词典》是这样描述对称性的：一个物体或任何一个整体，其各部分之间的恰当的比例、平衡、一致、协调、和谐，所产生的整体上的美感。

从对称性出发研究事物，是从整体上观察问题，研究一个集合的整体中各部分之间的关系。研究对称性最好的工具就是群论。

1.1 抽象群的定义

1.1.1 群的定义

一个包含元素 $A,B,C,\cdots$ 的集合 G，把它表示为 $G=\{A,B,C,\cdots\}$。所谓"群"是指这样的集合，集合 G 中的元素可以靠一种恰当的"乘法"(或称之为"群乘")彼此联系起来，这种群的乘法要求集合 G 中的任何两个元素结合成为第三个元素时，必须满足下列四个条件。

(1) **封闭性**。任何两个元素 A 和 B 相乘得到的新元素 C 必须在集合 G 的范围之内，即在群乘下集合是封闭的。

$$AB=C\in G$$

(2) **结合律**。三个元素 A,B,C 相乘，在元素的前后顺序不变的情况下，两次乘法运算的先后不影响最终的结果，可以先 AB 相乘，再乘以 C；也可以 A 乘以 BC 相乘的结果，即

$$(AB)C=A(BC)$$

但不要求 $AB=BA$，一般情况下 $AB\neq BA$。

(3) 集合 G 中必须有一个**单位元素**(或称"幺元")E，它与任何其他元素 A 相乘，都使得

$$EA=AE=A$$

(4) 集合 G 中任何一个元素 A 都有相应的**逆元素** A^{-1}，使得

$$AA^{-1}=A^{-1}A=E$$

也就是说，抽象群的定义包含两方面：群的乘法，以及乘法必须满足的四个条件。要从这两方面来考量，一组元素的集合 $G=\{A,B,C,\cdots\}$ 是否构成一个群。

1.1.2 对抽象群定义的解释和相关术语

1. 群的乘法

群的乘法是把分散的群元彼此之间联系起来的纽带。不仅限于算术中的数值乘积，在研究不同的具体问题中，根据问题的性质来定义或约定相应的乘法。例如，数值或矩阵的数学运算、晶体点群对称性的连续操作等，都可以作为群元素之间关联法则的乘法。

2. 群的阶数

群 G 中所有元素的总数 n，称为群的“阶数”(order)。如果 n 是一个确定的数，这个群是**有限群**，也可以称作 **n 阶群**。如果群 G 的阶数 n 是无穷大，这样的群称为**无限群**。

不论是有限群还是无限群都必须满足群的定义，对于有限群，群的阶数在群论方法的演算中是重要参数之一。

例 1.1 以算术中的乘法来定义群的乘法，整数 1 和 -1 构成一个二阶群 $\{1,-1\}$。其中 1 是单位元素，-1 与 1 互为逆元素，显然，二阶群 $\{1,-1\}$ 还满足封闭性和结合律。

3. 阿贝尔(Abelian)群

一般情况下，群的乘法中群元之间的顺序是不可交换的，$AB\neq BA$。但是如果相乘的群元是可交换的(或者说是可对易的)，即 G 中**任意**两个元素都能满足 $AB=BA$，那么这样的群是**阿贝尔群**，或称之为**交换群**。例 1.1 中的二阶群 $\{1,-1\}$ 就是阿贝尔群。

例 1.2 所有整数，$\cdots,-m,-(m-1),\cdots,-4,-3,-2,-1,0,1,2,3,4,\cdots,(m-1),m,\cdots$，构成一个集合。算术的加法定义为群的乘法，数值“0”为单位元素；每个整数 m 的逆元就是 $-m$。这个集合是封闭的，而且满足结合律。显然，这个集合构成一个无限群，而且这个群是阿贝尔群或交换群。

1.2 抽象群的实例和群的乘法表

1.2.1 二阶群

如果抽象地约定以数乘为群的乘法，由单位元素 E 和另一个元素 A 组成集合 $\{E,A\}$，按照群的定义，每个群元必须要有逆元，则必定是 $AA^{-1}=E$。显然，在二阶群中，只能是 $A^{-1}=A$，即 $AA=E$，例如，上面例 1.1 中的二阶群 $\{1,-1\}$。为了直观和应用方便，把抽象群的所有元素的相乘关系用乘法表的形式列出。表 1.1 就是二阶群的乘法表。

表 1.1 二阶群的乘法表

	E	A
E	E	A
A	A	E

在二阶群 $\{1,-1\}$ 中，具体的就是 $E=1$ 和 $A=-1$。在晶体的点群中我们还

可以找到不同群乘对应的、与群$\{E,A\}$具有相同乘法表的二阶群。

我们将在第 4 章全面系统地讲解晶体点群，在这之前为了便于理解群论的基本知识，需要应用一些点群的实例，为此将逐步地介绍一些晶体点群的对称操作，以及晶体点群中的最简单的极射平面投影图和相关符号。首先来看两个不同的二阶群 $C_{1h}=\{E,\sigma_h\}$和 $C_2=\{E,C_2\}$。

在极射平面投影图中，用**虚线圆**表示在书的纸面上的对称操作面，用“+”表示在纸面上方的定位点；用**实线圆**表示纸面是一个镜面，其作用是使纸面上方的定位点“+”经过镜面反射到达纸面的下方，成为纸面下方的定位点“○”；反之，镜面作为对称操作也可以使纸面下方的定位点“○”经过镜面反射到达纸面上方的定位点“+”。

(1) C_{1h}群$\{E,\sigma_h\}$，有两个群元，一个是单位元素 E(约定它在纸面上方，定位点用“+”表示)；另一个是 σ_h(其相对于 E 在纸面下方，用“○”表示)。以纸面为镜面的反射操作，水平镜面 σ_h 就用实线圆表示。这里 σ_h 既用来在图中表示群元 E 经镜面反射后的定位点，也用来表示水平镜面。如图 1.1 所示，在二维的纸面上“+”和“○”是在同一位置，但它们有上、下之分。元素 E 的定位点“+”照一下镜子反射到“○”，成为元素 σ_h。同样，元素 σ_h 的定位点“○”照一下镜子反射到“+”，成为元素 E。两次反射操作表示为 $\sigma_h\sigma_h=E$。可以验证 C_{1h}群$\{E,\sigma_h\}$元素的乘法表与表 1.1 相同，只是抽象的 A 变成了具体的σ_h。

(2) C_2 群$\{E,C_2\}$，有两个群元，一个是单位元素 E(用在纸面上方的“+”表示)；另一个是 C_2(位置也在纸面上方，用另一个“+”表示)，它的定位点是 E 绕垂直纸面过圆心的轴旋转 π 角度的位置，如图 1.2 所示。虚线圆表示没有镜面，圆心的小实心椭圆“⬬”表示过圆心且垂直纸面的二次轴 C_2，在二维的纸面上有两个“+”，其中一个是元素 E“+”，另一个是元素 C_2“+”。可以验证 C_2 群$\{E,C_2\}$的元素的乘法表与表 1.1 相同，只是抽象的元素 A 变成了具体的C_2。

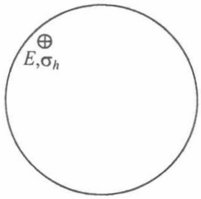

图 1.1 点群 C_{1h}的极射平面投影图以及相关符号

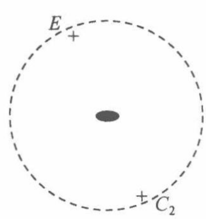

图 1.2 点群 C_2 的极射平面投影图以及相关符号

在以上两个具体的二阶点群 C_{1h}和 C_2 中，用到了最简单的覆盖操作，所谓覆盖操作指的是旋转、反射或反演等，这些操作使物体与原来的形状保持不变。有限群在物理上的重要实例是对称物体的覆盖操作的集合。例如，与 C_2 群的对称性相

似，以一个长方体的中心为原点，分别绕互相垂直的三维空间对称的坐标轴 x，y 和 z 轴旋转 π 角度，也是覆盖操作，分别记为 C_{2x}，C_{2y} 和 C_{2z}，我们约定 C_{2z} 作为主轴，记为 C_2。另外，对于一个球体，所有绕通过球心直径的旋转操作都是球形的覆盖操作。单位操作与不操作，或旋转 2π 角度的操作是一样的。每个操作的逆元在物理上是显而易见的，例如，一个旋转操作的逆操作是绕同一个轴，向相反方向转动相同的角度。

1.2.2　6 阶 D_3 点群

下面介绍本书要反复用到的实例 D_3 点群。D_3 点群的极射平面投影图以及相关符号见图 1.3(a)，虚线圆表示 D_3 点群中没有水平镜面反射的对称性操作。D_3 的对称操作包含如下两种类型的旋转操作。

(1) D_3 群有一类群元是在同一纸面内的三个二次轴，在图 1.3(a) 中，它们分别用标在虚线圆弧边沿的六个"⬬"和三条虚线来表示。纸面上的这三个二次轴之间的夹角都为$\dfrac{2\pi}{3}$。为了便于讨论抽象群的概念，约定这三个轴为 $C_2'=A$，$C_2''=B$，$C_2'''=C$。分别绕这三个轴旋转 π 角度的覆盖操作都使得纸面上方的点"+"转到下方的点"○"。具体地讲，选定图 1.3(a) 中水平虚线，或图 1.3(b) 中用 A 表示的 C_2' 轴，水平虚线上方的一个点"+"作为单位元素 E，通过 C_2' 轴的 π 角度旋转操作，使 E 点的"+"转到图 1.3(a) 中水平虚线下方的一个点"○"，将这个定位点标定为 C_2'。类似地，C_2'' 轴是图 1.3(a) 中向右倾斜的虚线，或图 1.3(b) 中的 B 轴，绕 C_2'' 轴的 π 角度旋转操作，使 E 点的"+"转到图 1.3(a) 中左侧上方的点"○"，定位点标为 C_2''；C_2''' 轴是图 1.3(a) 中向左倾斜的虚线，或图 1.3(b) 中的 C 轴，绕 C_2''' 轴的旋转操作，使 E 点的"+"转到图 1.3(a) 中左侧下方的点"○"，定位点标为 C_2'''。

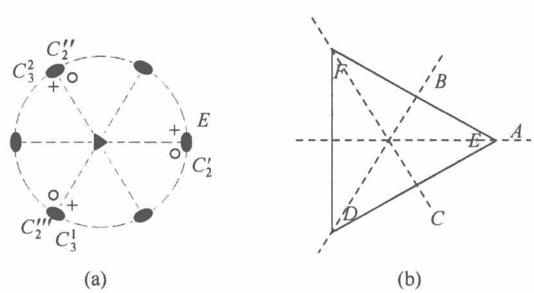

图 1.3　D_3 点群的极射平面投影图以及对称点相关的符号(a)，等边三角形的六个覆盖操作(b)

(2) D_3 群另一类对称操作是平面内的旋转。在图 1.3(a) 中，用虚线圆圆心处的一个"▲"表示通过圆心垂直纸面的三次轴。这个平面内有三个$\dfrac{2\pi}{3}$角度的旋转

操作。顺时针旋转$\frac{2\pi}{3}$角度的C_3^1($C_3^1=D$)和旋转$2\times\frac{2\pi}{3}=\frac{4\pi}{3}$角度的$C_3^2$($C_3^2=F$)，以及旋转$3\times\frac{2\pi}{3}=2\pi$角度的$C_3^3$($C_3^3=E$)三个旋转操作，从选定的$E$“+”通过$C_3^1$和$C_3^2$旋转操作，就可以分别得到图 1.3(a)中左侧下方的“+”C_3^1和左侧上方的“+”C_3^2。

注意，在学习中一定要练习以选定的参照点E“+”，通过任意一个对称操作群元，得到极射平面投影图上对应群元的定位点“+”或“∘”。极射平面投影图上定位点“+”和“∘” 的总数应等于群的阶数n。

与D_3群的对称性相似，一个等边三角形的六个覆盖操作也可以用群元A,B,C,D,E,F来表示，如图 1.3(b)所示，它们与D_3点群的对称性覆盖操作一一对应。我们用抽象群元A,B,C,D,E,F表示D_3点群的对称操作，可以从图 1.3(a)所示的点群D_3的对称操作逐一地构造填写相应的抽象群的乘法表 1.2。表 1.2 中左边第 1 列的元素是群乘时左边的元素，表中上方第 1 行的元素是群乘时右边的元素，例如，从图 1.3(a)中可以得出$AB=D$和$BA=F$，就在表 1.2 第A行与第B列交叉位置的格子中填上D，即位置点C_3^1。类似地，$CB=F$，$FD=E$等，这个表中每个记入的元素都是行元素与列元素的乘积。为便于说明，在表 1.2 中只列出了$AB=D$，$BA=F$，$CB=F$，$FD=E$的结果。

表 1.2　D_3群的部分元素群乘的结果

	E	A	B	C	D	F
E						
A			D			
B		F				
C			F			
D						
F					E	

逐一进行两个群元的相乘，最终就可以构造出 6 阶D_3点群对应的抽象群完整的乘法表，如表 1.3 所示。

表 1.3　6 阶D_3点群对应的抽象群的乘法表

	E	A	B	C	D	F
E	E	A	B	C	D	F
A	A	E	D	F	B	C
B	B	F	E	D	C	A
C	C	D	F	E	A	B
D	D	C	A	B	F	E
F	F	B	C	A	E	D

利用抽象群的乘法表便于讨论群的性质。从表 1.3 中可以验证，这六个元素的集合满足群乘的定义：封闭性、结合律、有一个单位元素 E、集合 G 中任何一个元素 A 都有相应的逆元素 A^{-1}。由于 $AB=D$，而 $BA=F$，$AB\neq BA$，这个群不是交换群。可以在乘法表中找出每一个群元的逆元，例如，在 D 行中找到 E 所对应的列是 F，那么 $D^{-1}=F$，同样 $F^{-1}=D$。另外，在表 1.3 中也显示出 $A^{-1}=A$，$B^{-1}=B$，$C^{-1}=C$。

如果只注重 D_3 点群的对称点在二维平面的位置，从线性代数的知识，我们可以用六个二维矩阵来表示六个群元，这六个矩阵所对应的对称性操作，引起平面上相应点的坐标变化。这六个矩阵组成的矩阵群 G 的乘法就是矩阵相乘，它们分别是

$$
\begin{gathered}
E=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\\
C=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad D=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix},\quad F=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}
\end{gathered}
\tag{1.2}
$$

可以用矩阵乘法验证这个矩阵群 G 的乘法表与表 1.3 是完全相同的。例如，$AB=D$，$CB=F$，$FD=E$ 等。

$$
AB=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}=D
$$

$$
CB=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{1}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}=F
$$

$$
FD=\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2}\\ \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}\begin{pmatrix}-\frac{1}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2}\\ -\frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{1}{2}\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix}=E
$$

另外要注意，对于旋转操作可以是顺时针旋转，也可以是逆时针旋转，对于 D_3 群我们采用了顺时针旋转，下面都如此沿用。而更多的情况人们习惯于逆时针旋

转。除了 π 角度的旋转，群元的矩阵是与旋转方向有关的。

1.2.3 同构群的概念

上述6阶矩阵群 G 和 D_3 点群的所有元素一一对应，它们遵循同一个乘法表，把它们称为是“同构”(isomorphic)的，或者说它们是“同构群”。同样，二阶群 $\{1,-1\}$ 和 C_{1h}，以及 C_2 群也是“同构”的。在1.9节还要具体介绍同构群。

1.3 群元的重排定理

从表1.3中可以看出 D_3 点群的所有群元，每个元素在乘法表中的每一列，或每一行中都出现一次，而且是只出现一次。这个规则称为**重排定理**，即群元顺序重新排列的定理。

群元的重排定理——如果 G_a 是群 G 中的任意一个固定元，A_k 是取遍 G 中的所有元，那么它们的乘积 $A_j=A_kG_a$ 也取遍 G 中的所有元，每个元素出现，且仅出现一次。

表现在群元的乘法表中这个定理就是：

(1) G_a 是群 G 中的任意一个选定的群元，它在乘法表中的每一行或每一列都必须出现一次，而且只出现一次。

(2) 每一行(或每一列)的所有群元与任何一个群元 A_k 相乘的结果，只是所有这些群元顺序的重新排列。

在乘法表中群元重新排列的性质是由群的封闭性决定的。群 G 是 n 个元素的序列 $\{A_1=E,A_2,\cdots,A_i,\cdots,A_k,\cdots,A_{n-1},A_n\}$。任意选一个元素 A_i 与群 G 中的 n 个元素(其中包含 A_i 本身)分别相乘，其结果必然还是这 n 个元素，只是序列的排列顺序变了。在这个新序列中群 G 的每个元素都会出现一次，如果任何一个元素出现两次，势必导致新序列中失去了另一个元素，这有违于群的封闭性。因此，新序列只是改变了原序列的群元排列顺序。当所选的元素 A_i 取遍所有群元，就得出群 G 的乘法表。

在构造一个群的乘法表时，群元的重排定理是重要的依据。

1.4 循　环　群

如果有这样的群，其中任何群元 B，都可以构造成一个序列 H：

$$H=\{B,B^2,\cdots,B^k,\cdots,B^{\alpha-1},B^\alpha=E\}$$

H 中每个群元都由 B 的某个幂次 B^k 产生，则这个群 H 叫做“循环群”(cyclic group)。其中，α 称为群 H 的周期。假如扩展这个序列，它将简单地按这个周期