

〔印度〕 A. W. 约什 著

物理学中的 群论基础

科学出版社

物理学中的群论基础

〔印度〕A. W. 约什 著

王锡绂 刘秉正 译
赵展岳 吴兆颜

科学出版社

1982

内 容 简 介

本书是为物理学工作者写的一本群论入门书。全书分八章。前四章介绍抽象群、希尔伯特空间、算符和群表示的基本理论，后四章介绍群论在量子力学、晶体、分子和固体物理学中的重要应用。

本书在多方面考虑到了初学者的困难。它包含了学习群论所需的数学准备知识；并且尽量通过具体例证使抽象的理论易于理解。每章之末都附有较多习题，以帮助读者检验自己对理论的掌握情况。本书讲述直观形象，并注意物理应用。

本书可作物理系大学生、研究生和物理工作者学习群论的教材或参考书。

本书译稿由刘秉正校订。

A. W. Joshi

ELEMENTS OF GROUP THEORY FOR

PHYSICISTS

John Wiley, 1977.

物理学中的群论基础

〔印度〕A. W. 约什 著

王锡绂 刘秉正 译

赵展岳 吴兆颜

责任编辑 陈咸亨

科学出版社出版

北京朝阳门内大街 137 号

中国科学院印刷厂印刷

新华书店北京发行所发行 各地新华书店经售

*

1982 年 12 月第 一 版 开本：787×1092 1/32

1982 年 12 月第一次印刷 印张：11 1/4

印数：0001—7,400 字数：254,000

统一书号：13031·2118

本社书号：2889·13—3

定价：1.75 元

2P7B/17

第 一 版 序 言

促使我写作本书的主要原因是，目前很难找到一本物理学工作者用的能自成体系的初级群论书。我个人的经验是，在学生时代为了得到群论和表示理论的初步知识，曾不得不查阅半打以上的群论书。人们希望有一本可以作为物理学研究生的群论课程的教本，能使初学者在入门阶段获得大部分（最好全部）群论知识。为此，我力图收集各种材料，诸如矢量空间、希尔伯特空间、算符、矩阵的直积、拓扑群、连通性和紧致性，等等。这些都是纯数学课题，一般学物理的学生只有进数学系才能掌握它们。

本书包括了一些有关课题，它们都是理解群论在物理学每一应用中所必不可少的；同时也包括了群论在量子力学、原子物理和固体物理中一些最重要的典型应用。例如，作为在量子力学中的一般应用，包括了对称性和简并性、好量子数、矩阵元定理、能级分裂和选择定则、动力学对称性和时间反转对称性，等等。在原子物理方面，讨论了群论在选择定则、塞曼效应、角动量加法、不可约张量算符和维格纳-艾卡特定理的应用。作为在固体物理中应用的例子，讨论了原子能级在结晶场中的分裂、布里渊区和晶体的电子结构。

我的主要目的之一是使本书作为一本入门书，因而常常为了明晰性而牺牲严格性。我力求做到使学生每前进一步都能透彻地掌握基本原理。在掌握了这些原理后，学生就可以自己在所希望的任何方向扩充其知识。举例来说，我认为关于连续群的第四章，将为基本粒子物理打下相当坚实的基础。但是，我们仅仅讨论了 $SU(2)$ 和 $SU(3)$ 的基本原理，一旦真

正接触到基本粒子物理时,我就立即止步了。

虽然在附录中也讨论了几个专门课题,但我相信,群论的大量应用仍然被略去了,诸如分子振动中对称性的作用、晶体的各种物理性质、结晶场理论、晶格动力学、基本粒子的高次对称性方式以及许多别的应用。但是我相信,大概只有专门家才涉及这些课题,本书目前的形式对初学者是够用的。

目前印度大学很少为物理学研究生开设群论课程。我衷心希望,有一本像本书这样的人门书可资利用,将促使更多的大学把群论早日纳入物理学研究生的课程表内。过去三年我根据本书的材料授课时,曾力图了解学生的困难,并修改叙述方式,消除各种障碍。我希望本书对教师和学生同样有用。

在每章末都备有大量习题。这有双重目的:第一,使学生能检验自己的理解程度,同时能更好更牢固地掌握有关原理;第二,部分习题也可看作有关章节内容的扩充。这些习题的结果常为后面的章节所利用。(下略)

约 什 (A. W. Joshi)

1973 年 8 月于印度密拉特

第 二 版 序 言

本书能出第二版,使我极为高兴。我很高兴地看到本书第一版受到了物理学工作者的普遍欢迎。在此期间我继续讲授群论课,学生们的反映使我深受鼓舞。

为了改进论述方式,在这一版中,对很多地方做了一些小改动,1.1、1.2、1.6、2.4、4.1 和 4.2 诸节的相当部分已重写、第四章增加了关于洛伦兹群的一节。(下略)

约 什

1976 年于印度密拉特

目 录

第一章 抽象群理论	1
1.1 什么是群	1
1.2 乘法表	9
1.3 共轭元素和类	12
1.4 子群	14
1.5 群的直积	18
1.6 同构和同态	19
1.7 置换群	22
1.8 给定阶的不同群	24
习题	27
第二章 希尔伯特空间与算符	32
2.1 矢量空间与希尔伯特空间	32
2.2 新记号下的坐标几何与矢量代数	38
2.3 函数空间	45
2.4 算符	50
2.5 矩阵的直和与直积	57
习题	61
第三章 有限群的表示理论	64
3.1 引言	64
3.2 不变子空间和可约表示	67
3.3 Schur 引理和正交性定理	73
3.4 正交性定理的解释	81
3.5 表示的特征标	82
3.6 例子—— C_{4v} 群	87
3.7 正规表示	90

3.8	不可约表示的对称化的基函数	92
3.9	其它可约表示	101
3.10	表示的直积	103
3.11	直积群的表示	107
	习题	112
第四章	连续群及其表示	114
4.1	拓扑群和李群	114
4.2	轴转动群 $SO(2)$	122
4.3	三维转动群 $SO(3)$	126
4.4	洛伦兹群	134
4.5	特殊么正群 $SU(2)$	137
4.6	$U(n)$ 和 $SU(n)$ 的生成元	148
4.7	李代数和李群表示	150
4.8	特殊么正群 $SU(3)$	153
	习题	158
第五章	量子力学中的群论 I	161
5.1	量子力学中的希尔伯特空间	161
5.2	函数的变换	165
5.3	空间平移和时间平移	168
5.4	哈密顿算符的对称性	172
5.5	对称性所引起的约化	176
5.6	微扰和能级分裂	182
5.7	矩阵元定理和选择定则	185
5.8	动力学对称性	189
5.9	时间反转对称性和空间反演对称性	196
	习题	204
第六章	量子力学中的群论 II	206
6.1	原子对称性	206
6.2	原子跃迁的选择定则	214
6.3	塞曼效应	215

6.4	角动量的加法	217
6.5	不可约张量算符	230
6.6	张量算符的矩阵元	240
	习题	244
第七章	晶体对称性和分子对称性	246
7.1	晶体点群	247
7.2	平移群和空间群	256
7.3	分子点群	260
7.4	点群的不可约表示	262
7.5	双群	271
7.6	原子能级的晶体场分裂	278
	习题	280
第八章	固体物理中的群论	283
8.1	晶体的电子结构问题	283
8.2	平移群和倒格子	284
8.3	空间群的不可约表示	291
8.4	自由电子能带: 一维和二维晶格	301
8.5	自由电子能带: 三维晶格	309
8.6	实际晶体的能带	317
	习题	325
附录 A	晶体的弹性系数	327
附录 B	压电现象与介电极化率	337
附录 C	时间反转对称性和简并	342
参考文献		346

第一章 抽象群理论

群的概念开始于一百五十多年前的十九世纪初叶。群论的早期发展归功于著名数学家高斯、柯西、阿贝尔、哈密顿、伽罗瓦、西勒维斯特等许多人¹⁾。但是直到 1925 年出现了近代量子力学之后，才发现它在物理学上有许多用处。贝特和维格纳等人(这里只提很少人)很快就认识到群论在物理学上的优越性，并把这一新工具用于计算原子结构和光谱。目前在物理学和物理化学的许多分支中，群论已经成为不可缺少的了。

虽然数学家往往对抽象群理论的形式发展有更大兴趣，物理学家却发现群的表示理论在量子物理和其他物理分支中有直接应用。在本章中，我们只讨论抽象群理论中对理解表示理论所需要的那些方面，在第三章和第四章将分别研究有限群和连续群的表示理论。

1.1 什么是群？

考察所有整数的集合 I ， $I = \{\cdots, -3, -2, -1, 0, 1, 2, \cdots\}$ ，并考察此集合的下列四个性质：(a) 集合 I 的任意两元素之和仍是一整数，从而属于此集合 I 。(b) 此集合包含一个叫做零的元素 0 ，它具有这样的性质，对于任意元素 $m \in I^*$ ， $m + 0 = 0 + m = m$ 。(c) 对于 I 的任意元素 m ，

¹⁾ Bell (1965)。

* 为便于初学者阅读，我们把本书使用的几个数学符号的意义介绍如下：

$\in$ ：属于； $\ni$ ：使得； $\forall$ ：对所有；

$\cup$ ：两集合之并； $\exists$ ：存在； $\cap$ ：两集合之交。

——译者注。

存在一个也属于 I 的唯一 n , 使得 $m + n = n + m = 0$; 显然, $n = -m$. (d) 若 m, n 和 p 是 I 的任意三元素, $m + (n + p) = (m + n) + p$; 这表示加法满足结合律。

考察另一集合: 所有 n 阶幺正矩阵的集合 $U(n)$, n 是一确定的有限正整数. 此集合有下列四个性质: (a) 若 U 和 V 是任意两个 n 阶的幺正矩阵, 它们的乘积 UV 仍是一个 n 阶幺正矩阵, 从而也属于集合 $U(n)$. (b) 此集合包含有单位矩阵 I , 它具有下面的性质: 对于任一 $U \in U(n)$, $UI = IU = U$. (c) 若 U 是 $U(n)$ 的一元素, 则存在一个唯一的 V , 它也在 $U(n)$ 中, 并且 $UV = VU = I$. (d) 若 U, V 和 W 是此集合的任意三元素, 则 $U(VW) = (UV)W$.

应当注意, 上述两集合满足的四个性质在本质上是很相似的. 事实上, 这些性质定义了一个群, 而上述两集合就是群的例子.

抽象地说, 一个群是一些不同元素的集合, $G = \{E, A, B, C, D, \dots\}$, 这些元素被赋予一合成法则(如加法, 乘法, 矩阵乘法等), 满足下列性质:

(a) G 中的任意两个元素 A 和 B 在给定法则下合成得到的元素仍然属于 G , 即

$$A \circ B \in G, B \circ A \in G. \quad (1.1)$$

符号“ $\circ$ ”表示 G 中两元素的合成. 用符号表述就是

$$A \circ B \in G, \forall A, B \in G.$$

这一性质叫做群的封闭性, 而称集合在给定的合成法则下是封闭的.

(b) 存在单位元素(单位元或恒等元) $E \in G$, 使得对所有的 $A \in G$,

$$E \circ A = A \circ E = A. \quad (1.2)$$

用符号表述就是

$$\exists E \in G \ni E \circ A = A \circ E = A \forall A \in G.$$

E 叫做 G 的单位元或恒等元.

(c) 对任意元素 $A \in G$, 存在一个唯一的元素 $B \in G$, 使得

$$A \circ B = B \circ A = E. \quad (1.3)$$

用符号表述就是

$$\forall A \in G \exists B \in G \ni A \circ B = B \circ A = E.$$

B 叫做 A 的逆(逆元), A 也叫做 B 的逆.

(d) 群元素的合成法则满足结合律, 即对任意 $A, B, C \in G$,

$$A \circ (B \circ C) = (A \circ B) \circ C. \quad (1.4)$$

用符号表述就是

$$A \circ (B \circ C) = (A \circ B) \circ C \forall A, B, C \in G$$

群中元素的个数叫做群的阶. 包含有限个元素的群叫做有限群; 包含无限多元素的群叫做无限群. 无限群又可以进一步分为分立群(离散群)与连续群: 如果群中元素的个数是可数无限的(例如所有整数的个数), 则群是分立的; 如果群中元素的个数是不可数无限的(例如所有实数的个数), 则群是连续的.

再举几个群的例:

(i) 由实数 $1, -1$ 组成的以普通乘法作为合成法则的二阶群.

(ii) 由复数 $1, i, -1, -i$ (其中 $i^2 = -1$) 组成的在乘法下的四阶群.

(iii) 前面提到的由所有实数组成的分立无限群. 此群的合成法则是加法, 其单位元是 0 .

(iv) 在加法运算下由所有实数组成的集合. 这是以 0 为单位元的连续群. 数 b 的逆是 $-b$.

(v) 在乘法运算下所有正 (0 除外) 实数的集合. 单位元是 1, 而 x 的逆是它的倒数 $1/x$.

(vi) 只包含单位元的单一点集是在乘法下的一阶群.

(vii) 在矩阵乘法下两个矩阵 $\begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}$ 和 $\begin{bmatrix} -1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$ 组成的集合.

(viii) 在矩阵乘法下所有满秩的 n (n 是正整数) 阶矩阵组成的集合.

(ix) 若 k 是一正整数, 由 k 个整数 $(0, 1, 2, \dots, k-1)$ 组成的集合是对于模 (k) 的加法群²⁾. 单位元是零, 而元素 r 的逆是 $k-r$.

(x) 设 p 是大于 1 的素数, $p-1$ 个整数 $(1, 2, \dots, p-1)$ 组成的集合是模 (p) 的乘法群³⁾. 单位元是 1, 而元素 r 的逆是 $(sp+1)/r$, s 是在通常意义下使 $sp+1$ 为 r 的整数倍的最小正整数.

(xi) 在矩阵加法下所有 $m \times n$ 阶矩阵的集合. 单位元是 $m \times n$ 阶零矩阵, 而元素 A 的逆元是它的负矩阵 $-A$.

在以上诸例中, 我们遇到关于标量(纯量)和矩阵的两个基本合成法则——加法和乘法. 当群的合成法则是加法时, 元素的逆元叫做加法逆元(负元); 当它是乘法时, 逆元叫做乘法逆元. 例如, 若 x 是一个数, 则 $-x$ 是加法逆元而 $1/x$ 是乘法逆元 (设 $x \neq 0$). 若 A 是一个矩阵, 则 $-A$ 是加法逆元, A^{-1} 是乘法逆元 (设 A 是满秩的). 同样, 在数群的情形下,

2) n 模 (k) 的定义是 n 被 k 除所得的余数. 例如, 10 模 (6) $=4$, 3 模 (3) $=0$, 等等. 在例 (ix) 中, 令 $k=6$, 则 $(3+4)=1$, $(5+1)=0$, 等等.

3) 见脚注 2. 在本例中, 若 $p=7$, 则 $3 \cdot 4=5$, $2 \cdot 5=3$, 等等. 4 的逆是 2 , 因 $4 \cdot 2=1$.

0 是加法单位元, 而 1 是乘法单位元; 在矩阵群的情形下, 适当阶的零矩阵是加法单位元, 而适当阶的单位矩阵是乘法单位元.

今后, 符号 “ $\circ$ ” 将省去. 例如, $A \circ B$ 将写作 AB . 同样, 我们将常常用群元素的“乘法”或“积”代替“合成”这个词.

群元素的积并不一定是可交换的(对易的), 即一般说来, $AB \neq BA$, 若群的所有元素都相互对易, 则称此群为阿贝尔群(交换群). 以后将要见到, 这样的群有一些重要的推论. 所有前面提到的群, 除了所有 n 阶么正矩阵组成的群 $U(n)$ 和所有满秩 n 阶矩阵组成的群外, 都是阿贝尔群.

1.1.1 变换群 物理学家特别感兴趣的是物理系统的变换群⁴⁾. 使物理系统保持不变的变换叫做系统的对称变换. 例如, 一个圆绕通过其中心并垂直于圆平面的轴的转动是它的对称变换. 在一个分子中, 两个相同原子的置换对分子来说也是对称变换.

现在来证明, 一个系统的所有对称变换的集合是一个群. 首先我们看到, 如果逐次施行两次对称变换, 系统仍保持不变. 因此系统的任意两个对称变换的合成, 仍然是一个对称变换, 即所考虑的集合对逐次变换是封闭的. 我们可以把对系统不进行变换定义为恒等变换(单位变换), 它显然属于这个集合. 我们知道, 给定一对称变换, 就有一个也属于这个集合的逆变换. 最后, 系统的逐次变换服从结合律. 这就证明所考虑的集合是一个群.

一个系统的所有对称变换组成的群叫做这个系统的对称群.

1.1.2 正方形的对称性群 设有一块从硬纸板割下来

4) 例如转动、反射、置换、平移等等.

的正方形，如图 (1.1) 所示。按图示对正方形上各点加以标记：四个角标为 a, b, c, d ；各边的中点标为 e, f, g, h ；中心则标为 O 。记为 $1, 2, \dots, 8$ 的各

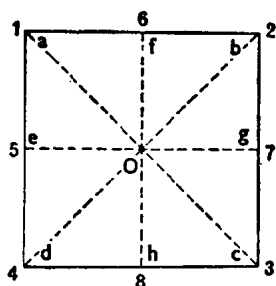


图 1.1 正方形的对称轴
和对称平面

点是固定在纸板上而不是在正方形上。现在我们把正方形绕垂直于它并通过 O 的轴线转动一直角。除了标记 $a, b, \dots, h$ 有所变动以外，我们看不出正方形有任何变化。试考察所有这样的对称变换（例如转动和反射，而没有弯曲和拉伸），它们使正方形的边界位置不发生变化，

只是对点 $a, b, \dots, h$ 给出不同标记。在列出所有这些变换以前，先对我们要用的记号说明几句。

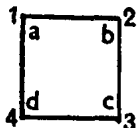
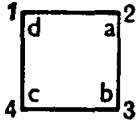
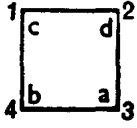
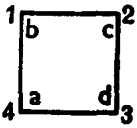
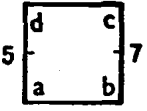
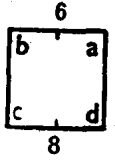
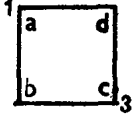
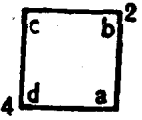
如果绕某轴线转动角度 $2\pi/n$ (n 是正整数) 使系统保持不变，则此轴线叫做系统的 n 重对称轴，相应的操作记作 C_n 。 C_n 的整数幂也是系统的对称变换，记作 C_n^k ，它表示对系统逐次施以 k 个 C_n 操作，即绕轴转动 $2\pi k/n$ 角。对平面的反射用带有表征反射平面的下标的 m 或 σ 标记。恒等变换记作 E 。

在列举正方形的所有对称变换 [这些都列在表 1.1 中] 时，我们用略语“对一直线的反射”表示“对过该直线并垂直于正方形的平面的反射”。

可以看出，表 1.1 列出的操作完全包括了正方形的所有对称变换，即再没有别的变换可以使正方形处于同一位置而只是对点 $a, b, \dots, h$ 给以不同的标记。可能认为有对中心 O 的反演，但很容易证明它与 C_4^2 相同。

注意到下面这一点是有意义的，这八个变换对应于坐标轴都与正方形各边平行的笛卡儿坐标系的八种不同取法，如

表 1.1 正方形的对称变换

符 号	操 作	结 果
E	恒等操作	
C_4	绕垂直于正方形并通过 0 的轴线沿顺时针方向转 90°	
C_4^2	绕上述轴线转 180°	
C_4^3	绕同一轴线沿顺时针方向转 270°	
m_x	对直线 5—7 的反射	
m_y	对直线 6—8 的反射	
σ_u	对直线 1—3 的反射	
σ_v	对直线 2—4 的反射	

图(1.2)所示。我们或者把坐标系看成固定的,正方形在变换,这就是所谓主动观点;或者把正方形看成固定的,坐标系在变换,这就是所谓被动观点。必须注意,主动观点中的变换相当于被动观点中的逆变换。例如,如果在主动观点中,把 C_4 定义为正方形沿顺时针方向转动,则在被动观点中 C_4 必表示坐标系沿逆时针方向转动。这一约定为本书到处所采用并明显地表示在图(1.2)中。

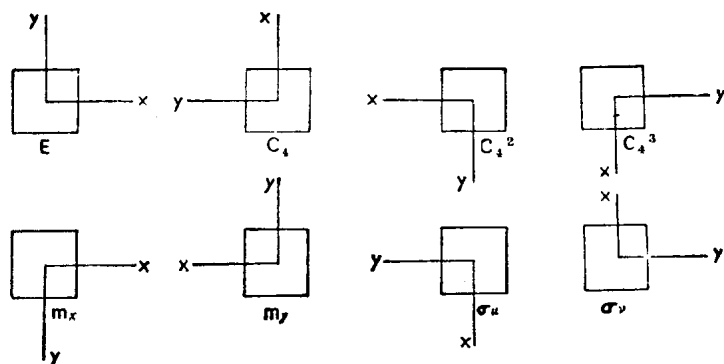


图 1.2 正方形变换与笛卡儿坐标系变换是等效的。

容易证明,表 1.1 中列出的八个变换组成一个群,即正方形的对称性群。例如,考察对正方形施以操作 C_4 再继之以操作 σ_u , 这可由下式得出:

$$\sigma_u C_4 \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = \sigma_u \begin{bmatrix} d & a \\ c & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} d & c \\ a & b \end{bmatrix} = m_x \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix}. \quad (1.5)$$

可以用算符记号把它表为:

$$\sigma_u C_4 = m_x, \quad (1.6)$$

上式表明,对于正方形,操作 $\sigma_u C_4$ 和操作 m_x 给出相同结果。

一个算符的逆是抵消此算符效果的算符。例如,考虑对

正方形的逐次操作 $C_4^3 C_4$:

$$C_4^3 C_4 \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = C_4^3 \begin{bmatrix} d & a \\ c & b \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} = E \begin{bmatrix} a & b \\ d & c \end{bmatrix} \quad (1.7)$$

如果把 C_4 和 C_4^3 的操作次序倒过来将得到同样的结果。因此根据式 (1.3), C_4 是 C_4^3 的逆, C_4^3 也是 C_4 的逆。这可以用算符记号表为:

$$(C_4)^{-1} = C_4^3 \quad \text{或} \quad C_4 C_4^3 = C_4^3 C_4 = E. \quad (1.8)$$

留作习题证明,八个对称变换中的每一个都有一个逆,此逆就是八个变换中的一个。

最后,变换服从结合律。因此正方形的对称变换组成一个群。在结晶学中⁵⁾,正方形的八阶对称性群记为 C_{4v} 。

1.2 乘法表

让我们考察下面的操作

$$C_4 m_x = \sigma_u, \quad \sigma_u C_4^3 = m_y,$$

$$\sigma_u \sigma_v = C_4^2, \quad \text{等等}$$

所有这些群元素之积可以用一个表表明,此表叫做群乘法表。对于正方形的对称性群 C_{4v} , 这就是表 1.2。注意,像 ABC 这样的逐次操作的顺序是由右到左。例如,在乘积 $C_4 m_x$ 中, m_x 是第一操作, C_4 是第二操作。所以 $C_4 m_x$ 在表 1.2 中处于跟 m_x 对应的列和跟 C_4 对应的行。

在写出群的乘法表时,行和列的次序是无关紧要的。我们这里对行和列选取不同的次序,使第一列的每一元素(第

5) 结晶点群将在第七章讨论。如果代替反射而考虑绕图 (1.1) 中的四条虚线转动 π 角,将得到 D_4 群,此群也是正方形的对称性群,包含八个元素 ($E, C_4, C_4^3, C_2, C_2', C_2'', C_2''', C_2''''$) 在这里 C_2 表示绕直线 5—7 的二重转动,等等。详细内容见第七章。