况蕙孙　白铭复　编著

物理学中的群论方法

○上册○

WULI XUEZHONGDE QUNLUNFANGFA

国防科技大学出版社

物理学中的群论方法

·上　册·

况蕙孙　白铭复　编著

国防科技大学出版社

内 容 介 绍

本书系统地讲述群论及群表示论的基本内容，着重讨论了有限群的表示，李群李代数的基本理论，半单李群李代数的分类和表示问题，群论与量子力学的关系，以及运用群论原理处理物理学中的对称性问题的一般方法。对于物理学中的常见群，如分子点群、晶体点群、空间群、旋转群、洛仑兹群、幺正群等都作了详细的描述，对它们的结构和表示给出了简洁而严谨的论证与推演。

本书在陈述方式、证明方法和材料组织等方面兼顾了数学的严谨性与便于具有相当于大学物理专业高年级学生的数理基础的非数学专业读者的阅读两个方面的要求，在取材方面，同时照顾了分子原子物理、固体物理、核物理、粒子物理等专业的读者对群论知识的共同和特殊的需要。

全书分上、下两册。上册包括对物理学中常见群的描述与推导，群论和群表示论基础，有限群的表示理论；下册包括李群李代数的表示理论，置换群的表示，空间群的表示，群论与量子力学的关系（应用）。

本书可作为高等学校物理和化学方面有关专业的高年级本科生以及研究生的群论课教材或参考书，也可供物理、化学、数学工作者或教师参考。

物理学中的群论方法

·上 册·

况蕙孙 白铭复 编著

责任编辑 马立群

封面设计 侯 云

国防科技大学出版社 出版

湖 南 省 新 华 书 店 发 行

国 防 科 技 大 学 印 刷 厂 印 装

开本：$787\times1092\ \frac{1}{32}$ 印张：$6\frac{9}{16}$ 字数：157.000千字

1985年12月第1版 1987年7月第2次印刷 印数：3 001-6 000册

统一书号：15415·008 定价：1.40元

序 言

群论是现代数学中概括性最强、对数学的各个领域影响最大的分支之一。在其发展过程中曾引起了许多数学大师的热忱和偏爱，Klein 认为群会把整个数学统一起来，Poincaré 也曾说过："…群论就是那摒弃其内容而化为纯粹形式的整个数学"。但这一数学理论的高度抽象的外表却阻碍了物理学家对它的理解能力。在群论方法被引入物理学（Weyl、Wigner、Neuman 等）的初期（本世纪30年代），甚至在第一流的物理学家当中也发生过反对"群灾难"的倾向(如Dirac 与 Slatar)。因而曾经存在着一种流传很广的见解，认为群论方法对于广泛的应用来说过于复杂，而所有的结果采用较简单的方法都能得到。如今已经很清楚，这种见解是不对的。事实上，群论已经成为现代物理学中最有用的数学理论之一。特别是在对称性起重要作用的领域，如原子分子物理、固体物理、原子核物理、粒子物理、量子化学等当中，伴随着知识的更新和现代化，群论方法已被越来越广泛的采用。与此相应的，这些领域内的科技工作者对于群论方法的系统知识的需求也在日益增长。目前，各高等学校的有关专业多已将群论列为高年级学生和研究生的选修或必修课。

但是，当初群论方法遭到部分物理学家抵制的根源至今并未完全消除。这就是群论相对于物理（化学）工作者的知识结构（指数理方面）来说，仍具有较高的难度。"数学的群论"已经发展成为一个结构严谨的庞大的理论体系，而其中与物理学（化学）的关系较为密切的部分往往属于这个体系的"上层

建筑”，某些上层建筑部分(例如关于李群的分类与表示问题)即使对于数学工作者（非代数专业）来说也不是都很熟悉的。因而，如何将“数学的群论”中对物理学有用的部分组织成为一个易于使物理学家接受的逻辑上完整的体系，即“物理的群论”，这显然是一个重要而困难的问题。已经有一些学者在这方面进行了努力，并写出了不少属于“物理的群论”的著述，但问题仍未能够解决得令人十分满意。

本书试图从表述方式、论证方法、材料的组织和详尽程度等方面对上述情况加以改善。

我们假定读者已经熟悉了与物理系本科生的课程深度相应的线性代数、量子力学、固体物理方面的知识。

全书分上、下两册。上册即前四章。第一章从物理体系的对称性出发引入对称群的初步概念，对分子点群、晶体点群、空间群、旋转群、置换群、洛仑兹群、幺正群进行了详细地描述和推导。第二章和第三章分别为群论和群表示论的基础，讲述了必要的基本概念和一般原理，并列举了第一章中讨论过的大量具体例子作为对较抽象的概念和原理的直观解说和简明例证。第四章是有限群的表示理论，介绍了群代数和正则表示的概念，系统地阐述了特征标理论，证明了关于既约表示矩阵元和单纯特征标的正交、完备性定理以及关于既约表示的个数和维数的定理；计算了晶体点群的既约表示和特征标；导出了利用广义投影算子来约化已知表示空间的一般方法。

下册即后四章。第五章讨论李群李代数的表示理论：首先作为导引，对 $SO(3)$ 和 $SU(2)$ 的表示作了完整而详细的讨论；关于李群和李代数的一般理论主要是按照 Racah 的思路进行的，但在概念的陈述和数学推演论证方面作了某些简化和相当详尽的扩充，利用根的概念讨论了半单李群李代数的分类，利用权的概念讨论了半单李群李代数的表示；关于典型群的具

体结果是作为一般理论的例子给出的，特别对于$SU(3)$、$SO(4)$、L_g的表示进行了较详细的讨论。第六章讲述群论与量子力学的关系，着重阐明将群论(群表示论)用于物理学（主要是量子力学）中的对称性问题的一般原理和方法。第七章系统地介绍置换群的表示理论，对其中的数学推演作了较为简洁的处理。第八章讲空间群的表示与晶体中的电子态。

编　者

1985年元月

目　　录

序　言

第一章　物理学中的对称性与对称群

§ 1　对称性的意义与描述……1

1.1　几何图形的对称性……1

1.2　物理体系的对称性……3

1.3　对称变换……4

1.4　对称群……9

1.5　破缺的对称性……11

§ 2　分子的对称性与分子点群……12

2.1　空间操作的基本类型……12

2.2　分子的点对称性……15

2.3　点操作的运算性质　点群的乘法表……19

2.4　非线型分子与有限点群……22

2.5　第一类（有限）点群……23

2.6　第二类（有限）点群……28

§ 3　晶体的对称性与晶体点群、空间群……32

3.1　晶格的对称操作……32

3.2　晶体点群……38

3.3　格群与布喇菲格子……40

3.4　晶体空间群（空间群）……43

§ 4　旋转对称性与旋转群……48

4.1　旋转对称……48

4.2　旋转群的参数化……49

4.3　旋转群的矩阵表示……51

4.4　旋转矩阵的指数形式……52

4.5　旋转群上的不变积分……55

§ 5　置换对称性与置换群……59

5.1　置换群……59

5.2　置换的轮换表示……61

5.3　置换的循环结构……62

§6 相对性原理与洛仑兹群……65
6.1 正常洛仑兹变换……65
6.2 正常洛仑兹群……70
6.3 全洛仑兹群与推广的洛仑兹群……73
§7 幺正对称与特殊幺正群……75

第二章 群论基础

§8 群的一般概念……84
8.1 抽象群……84
8.2 连续群……86
§9 群的主要子集……92
9.1 子群……92
9.2 生成元……94
9.3 类……97
9.4 不变子群……100
9.5 群的直积……101
§10 群的同构与同态……104
10.1 同构……104
10.2 同态……104
10.3 同态定理……107

第三章 群的表示理论

§11 群的线性表示……108
11.1 表示的一般定义……108
11.2 表示的等价性……112
11.3 等价酉表示的存在定理……114
§12 表示的可约性……115
12.1 可约表示与不可约表示……115
12.2 完全可约性定理……120
12.3 表示的约化……121
§13 对偶表示与乘积表示……123
13.1 对偶表示……123
13.2 乘积表示……124
13.3 不可约表示的积乘中含有单位表示的条件……126
§14 与群的表示可对易的算子……127
14.1 Schur引理……127
14.2 与给定表示可易的算子（矩阵）……130
14.3 直积群的表示……135
§15 例子——一些简单群的表示……137
15.1 循环群的表示……137
15.2 有限可换群的表示……138
15.3 置换群 S_3 与点群 C_{3v} 的表示……139

15.4 定轴转动群$SO(2)$的表示 ……142
15.5 定轴转动——反映群 $O(2)$ 的表示 ……143
15.6 点群 $D_{\infty h}=O(2)\times C_i$ 的表示 ……147

第四章 有限群的表示

§16 群代数与正则表示 ……149
16.1 群代数 ……149
16.2 正则表示与群代数的对称基 ……152
16.3 关于表示的个数和维数的定理 群代数的结构 ……158
§17 特征标与正交性定理 ……162
17.1 特征标 ……162
17.2 不可约表示矩阵元的正交完备性 ……163
17.3 单纯特征标的正交性关系 ……166
17.4 单纯特征标的计算 ……168
§18 特征标理论在群表示论中的应用 ……174
18.1 表示的约化与唯一性定理 ……174
18.2 表示的等价性判据 ……176
18.3 表示的可约性判据 ……177
18.4 关于直积群的不可约表示的构造 ……177
18.5 单纯特征标的 Wigner 和 ……178
§19 晶体点群的单纯特征标与不可约表示 ……182
19.1 晶体点群的同构关系 ……182
19.2 七个基础点群的单纯特征标与不可约表示 ……184
§20 表示空间的约化 ……188
20.1 表示（空间）的约化问题 ……188
20.2 对称化算子 ……190
20.3 对称基的建立 ……193
参考书目 ……197

第一章　物理学中的对称性与对称群

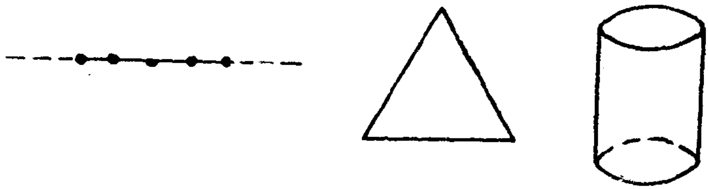
对称性是自然界的一个重要特征，它使自然规律，特别是物理规律具有和谐优美的形式。对称性对于物理过程常常提出某种严格的限制，因而具有明确的“物理效果”。在已知物理体系对称性的情况下，可以通过对它的分析来揭示其所蕴含的物理效果，从而或者完全迴避、或者以对称性所能提供的最大限度充分简化可能是高度困难的具体的数学分析，例如多体薛定谔方程的求解问题。反之，对于了解得很不充分的物理体系，如基本粒子，也可以从有限的观测数据出发去推测它应具有的对称性质，而后者一旦确立便可预言更多的物理结果。因此，对称分析的方法——即群论方法——在近代物理的许多分支中都具有重要作用。本章将讨论物理学中一些最重要的对称性，并引入描述这些对称性的数学工具——相应的对称群。

§1　对称性的意义与描述

1.1　几何图形的对称性

对称性的概念是在非常广泛的意义下使用的，但这概念的直观模型可以追溯到几何形体的对称。考察图 1.1 中的几何图形，可看到它们具有某种对称性。这里对称性一词的确切含意应该是指这些图形在某些确定的变动之下能够复原，这些变动可以是平移、转动、关于某一点的反演、关于某一平面或直线

的反映，即一切可能的空间等距变换。这种能使某一图形复原



(a) 一维等距无穷点列　　(b) 平面等边三角形　　(c) 直圆柱体

图 1.1

的变动，通常称为这个图形的对称操作或对称变换。

为了具体刻画出一个图形的对称性，一个直接的方法是罗列出这个图形的全部对称操作。这是对图形对称性的一种完全的描述，它具有数学的准确性。例如，图形 1.1(a) 的对称性可以准确地表述为，它的全部对称操作是｛移距为点间距整数倍的移动，关于点列中的一点的反演，关于点列中任意相邻两点的中点的反演｝。图形 1.1(b) 的对称性可表述为，其全部对称操作是｛绕三角形的中心转角 0、$\frac{2\pi}{3}$、$\frac{4\pi}{3}$，关于每个角分线的反映｝。图形 1.1(c) 的对称性可表述为，其全部对称操作是｛绕圆柱的轴旋转任意角，旋转后再关于圆柱的中心反演，关于过轴线的任一平面的反映，绕过圆柱的中心且垂直于轴线的直线转角 π｝。当然，为了给出一个图形的对称操作的集合，有时只指出其中的一部分操作即可，因为其余的操作可以由这一部分操作通过各种结合来生成。

另外，对于几何图形来说，还有一种更简便的描述其对称性的方法，就是指出它的全部对称元素——转轴（指明最小转角或轴次）、反演中心、反映面等等，一个对称元素关联着一

组对称操作。例如，图形 1.1(*c*) 的对称性也可以表为，其对称元素为 {一个轴次为∞，即可转任意角的轴——柱体的轴线，一个反演中心——柱体的中心，一个垂直于轴的映面，∞个通过轴的映面，∞个垂直于轴的二次转轴(最小转角为 $2\pi/2=\pi$)}。在这个例子中，实际上只需指出一部分对称元素：一个∞次轴，一个中心，∞个二次轴，其余的对称元素可由它们推出。与对称元素这一几何概念不同，对称操作或对称变换的概念可以在更广泛的意义下使用，因而能够用以描述更一般的对称性质。

1.2 物理体系的对称性

我们所关心的，是物理系统的行为在多大程度上以及如何受其对称性的支配。

首先要明确对称性的含意和描述方法。对物理体系来说，其对称性当然是与其结构相关的，狭义地说，与其几何构形相关。例如，原子具有球对称性，分子具有与其几何构形相应的对称性，晶体具有其空间点阵的几何对称性等等，但这是很片面的。

事实上许多重要的对称性并不具有直接的几何意义，例如全同粒子之间的对称性，质子和中子在核力方面所表现出的对称性等。那么，说物理体系具有某种对称性的准确含义应当是什么呢？这是指体系的运动方程在某些变换下的不变性，而这些变换则称为体系或其运动方程的对称变换。

决定物体行为的运动方程取决于相互作用（内部的和外部的），因而体系的对称性也就是相互作用的对称性，即相互作用（包括“外場”）在某些变换下的不变性。由于物体的几何构形是决定相互作用的因素之一，上述的一般概念自然将几何构形方面的对称性包含在内。这里所说的变换包括时空变换，

粒子的置换变换，以及反映粒子内部性质的正反粒子共轭变换，么正变换，等等。

在非相对论量子力学中，经常使用外埸的概念，外埸的存在使体系在空间方面的对称性降低为外埸的几何对称性；其次，全同粒子的置换对称性对多体问题显然是重要的。因此，这两种对称性对于原子，原子核，分子，固体等的非相对论量子理论具有突出的重要性；本书的主要篇幅正是针对这些对称性的。

1.3 对称变换

现在以空间变换和粒子的置换变换为例，说明这些变换在体系的态矢（波函数）空间中的导出形式及一个变换成为体系的对称变换的条件。

用符号 g 表示坐标空间的一个等距变换，它将点$\boldsymbol{r}$搬到（变为）点 $\boldsymbol{r}'$，记为

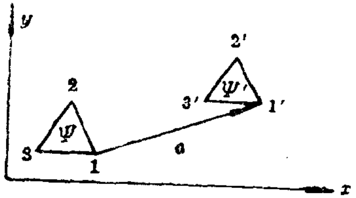
$$\boldsymbol{r}' = g\boldsymbol{r} \tag{1.1}$$

例如，当 g 分别为平移$\boldsymbol{a}$、绕 z 轴转 α 角、对于原点的反演操作时，式(1.1)可具体表为

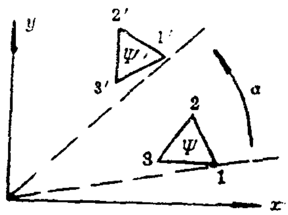
$$\begin{cases} x' = x + a_x \\ y' = y + a_y, \\ z' = z + a_z \end{cases} \quad \begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} \cos\alpha & -\sin\alpha & 0 \\ \sin\alpha & \cos\alpha & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix} x' \\ y' \\ z' \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} -1 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} x \\ y \\ z \end{pmatrix}$$

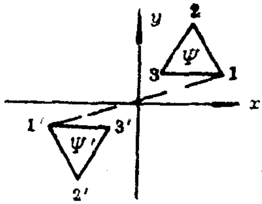
对于量子体系来说，对它施行空间变换 g 意味着将它的状态Ψ在空间中作一次相应的搬动，即将Ψ变为新态Ψ'，而Ψ'是Ψ在空间中搬动了 g 后得到的。图 1.2 中画出了状态的平移、转动和反演的示意图。暂不考虑自旋，Ψ是空间坐标的标量函数，按定



(a) 平移 a



(b) 绕 z 轴转 α 角



(c) 对原点反演

图 1.2

义，Ψ' 在 $\boldsymbol{r}'=g\boldsymbol{r}$ 处的值即为Ψ在 $\boldsymbol{r}$ 处的值，可写为

$$\Psi'(g\boldsymbol{r})=\Psi(\boldsymbol{r})$$

注意$\boldsymbol{r}$是变数，如将$g\boldsymbol{r}$重新记作$\boldsymbol{r}$，则$\boldsymbol{r}$应记作$g^{-1}\boldsymbol{r}$，g^{-1} 表示 g 的逆操作，因而上式又可写为

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{1.2}$$

由状态 $\Psi(\boldsymbol{r})$ 到状态 $\Psi'(\boldsymbol{r})$ 的变换也可以用对波函数的某种运算来实现，用 $\hat{g}$ 表示这个运算的算子，记作

$$\Psi'(\boldsymbol{r})=\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}) \tag{1.3}$$

又可写

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r})=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}) \tag{1.4}$$

(1.4)式亦可看作算子$\hat{g}$的定义。容易证明，$\hat{g}$是态矢空间（希尔伯特空间）中的线性幺正算子。对于多粒子体系，(1.4)式应改为

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)=\Psi(g^{-1}\boldsymbol{r}_1,g^{-1}\boldsymbol{r}_2,\cdots,g^{-1}\boldsymbol{r}_n) \tag{1.5}$$

当g为空间反演时，$\hat{g}$便是宇称算子

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r})=\Psi(-\boldsymbol{r}) \tag{1.6}$$

当g为空间平移($\boldsymbol{a}$)时，$\hat{g}$是平移算子。从式(1.4)出发，利用泰勒展开技术不难证明，平移算子的显式为

$$\hat{g}(\boldsymbol{a})=e^{-\boldsymbol{a}\nabla}=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{a}\cdot\hat{\boldsymbol{P}}} \tag{1.7}$$

其中$\hat{\boldsymbol{P}}$是动量算子，对多粒子体系$\hat{\boldsymbol{P}}$为总动量算子，算子的指数函数定义为

$$e^{\hat{K}}=1+\hat{K}+\frac{\hat{K}^2}{2!}+\cdots+\frac{\hat{K}^n}{n!}+\cdots \tag{1.8}$$

当g为空间转动时，设转动矢量为α，它的方向为转轴方向，大小为转角，$\hat{g}$便是转动算子。同样可证，转动算子的显式为

$$\hat{g}(\alpha)=e^{-\boldsymbol{\alpha}\times\nabla}=e^{-\frac{i}{\hbar}\boldsymbol{\alpha}\cdot\hat{\boldsymbol{L}}} \tag{1.9}$$

其中$\hat{\boldsymbol{L}}$为总轨道角动量算子。

以上考虑了体系的空间变换，它表现为状态的线性幺正变换。当我们对体系施行置换粒子的变换时，情况也是如此。设g为对n个数码（例如粒子的编码）的一个置换

$$g=\begin{pmatrix}1 & 2\cdots n\\ s_1 & s_2\cdots s_n\end{pmatrix} \tag{1.10}$$

对体系的粒子作此置换，也意味着对体系的状态施行一次变

换，用算子 $\hat{g}$ 来表示这个变换，可写

$$\hat{g}\Psi(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)=\Psi(\boldsymbol{r}_{s_1},\boldsymbol{r}_{s_2},\cdots,\boldsymbol{r}_{s_n}) \qquad (1.11)$$

其中$\boldsymbol{r}_i$代表第 i 个粒子的全部变数。易证，由式(1.11)定义的 $\hat{g}$ 也是态矢空间中线性幺正变换。

除了上面两类变换之外，如前所述还有其他类型的变换。由于量子力学中的概念并不都具有经典对应，因而对量子体系施行的变换一般并不能象上面那样由相应的经典概念直观地引出，而是直接由对系统状态的运算给出的。对这一点，不拟作一般的讨论。

对给定的体系，变换 $\hat{g}$ 是否对称变换要由体系的运动方程在 $\hat{g}$ 下是否改变来决定，即要看Ψ与$\hat{g}\Psi$是否满足同一方程。设体系的运动方程为

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}\Psi=\hat{H}\Psi \qquad (1.12)$$

$\hat{H}$为体系的哈密顿算子。假定 $\hat{g}$ 是一个与 t 无关的变换，将其作用于式(1.12)的两边得

$$i\hbar\frac{\partial}{\partial t}(\hat{g}\Psi)=\hat{g}\hat{H}\hat{g}^{-1}(\hat{g}\Psi) \qquad (1.13)$$

Ψ和 $\hat{g}\Psi$ 所满足的方程(1.12)和(1.13)是否为同一个方程，显然取决于是否有

$$\hat{g}\hat{H}\hat{g}^{-1}=\hat{H} \quad 或有 \quad \hat{g}\hat{H}=\hat{H}\hat{g} \qquad (1.14)$$

上式表明：一个变换成为对称变换的充分必要条件是，它的算子与体系的哈密顿算子可易。

全同粒子在物理上是完全平等的，因而当交换体系中的全同粒子的变数时，体系的能量值不会改变。过渡到量子语言，这就是体系的哈密顿算子在全同粒子的置换变换下不变，即有式(1.14)成立。因此，在任何情况下，全同粒子的置换变换是体系的对称变换。

对于空间变换，情况稍复杂些。我们将$\hat{H}$分为动能、内部作用能和在外場中的势能三部分（为简单起见，暂不考虑自旋），即

$$\hat{H}=\hat{T}+\hat{V}_{内}+\hat{V}_{外}$$

如果将$\hat{H}$形式地写为$\hat{H}(\boldsymbol{r}_1,\boldsymbol{r}_2,\cdots,\boldsymbol{r}_n)$，其中$\boldsymbol{r}_i$标记$\hat{H}$与第$i$个粒子的坐标变数以及对第$i$个粒子的坐标的导数(动量)$\nabla_i$有关，则可写

$$\hat{g}\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\hat{g}^{-1}=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.15)$$

其中$g^{-1}\boldsymbol{r}_i$表明原$\hat{H}$中的$\boldsymbol{r}_i$已用$g^{-1}\boldsymbol{r}_i$取代，∇_i也用相应的由$\boldsymbol{r}_i$导出的变换式所取代。式(1.15)容易由式(1.5)推出

$$\begin{aligned}&\hat{g}\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\hat{g}^{-1}\Psi(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\\&=\hat{g}[\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)]\\&=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots g^{-1}g\boldsymbol{r}_i\cdots)\\&=\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)\Psi(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)\end{aligned}$$

注意到Ψ是任意态矢，上式与(1.15)式等价。这样，空间操作g成为体系的对称操作的条件可以更直接地表为

$$\hat{H}(\cdots g^{-1}\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots)$$

或为

$$\hat{H}(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{H}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.16)$$

上式是“$\hat{H}$在操作g下不变”的更为直观的表述形式。由式(1.16)容易作出如下判断：因为$\hat{T}$是∇_i^2的函数，而$\nabla^2(=\nabla\cdot\nabla)$象$d\boldsymbol{r}\cdot d\boldsymbol{r}(=dx^2+dy^2+dz^2)$一样变换，故$\hat{T}$在任意空间等距变换下不变；在二体作用下$\hat{V}_{内}=\sum\limits_{i<j}U(|\boldsymbol{r}_i-\boldsymbol{r}_j|)$，在空间等距变换下也不变；从而$\hat{H}$的不变性条件归结为$\hat{V}_{外}$的不变性

$$\hat{V}_{外}(\cdots g\boldsymbol{r}_i\cdots)=\hat{V}_{外}(\cdots\boldsymbol{r}_i\cdots) \qquad (1.17)$$

所以体系的空间对称操作即是不改变外場的操作。

这里顺便指出，对于孤立系而言，任意空间操作（指空间的等距变换）都是对称操作，这一点可以在更普遍的意义下来