群论——群表示及本征方程

朱诚久 编著

吉林大学出版社

群　　论

——群表示和本征方程

吉 林 大 学 出 版 社

群　论
——群表示和本征方程
朱诚久　编著

责任编辑：王瑞金　　　封面设计：孙　泓

吉林大学出版社出版　　　吉林省新华书店发行
（长春市东中华路 29 号）　　　长春市东方印刷厂印刷

开本：850×1168 毫米　1/32　　1993 年 12 月第 1 版
印张：11.5　　　1993 年 12 月第 1 次印刷
字数：283 千字　　　印数：1—500 册

ISBN 7-5601-1465-2/O・164　　　定价：3.75 元

前　言

在近期物理学的发展中，特别是在粒子物理、原子核物理和凝聚态物理方面，对称性处于令人瞩目的地位。因之，研究对称性的数学方法——群论得到物理学界的普遍重视。它已成为许多大学物理系高年级学生的选修课和研究生必修课。

自1977年高校恢复招生以来，作者一直进行群论方面的教学和科研工作。一方面对传统的教学内容有进一步深入的体会，另一方面也不断探索一些新问题，进而在多次改编教学讲义的基础上写成本书。

本书共七章。第一、二章讲述通常群论的基本知识和群表示论。第三章用群代数方法建立求出有限群不可约表示的本征方程。第四章通过本征方程求得置换群和辫子群的不可以表示矩阵。第五章讨论连续群及其表示，求得 $O(2)$ 群、$O(3)$ 群、$SU(2)$ 群、$SU(3)$ 群以及 $SO(4)$ 群的不可约表示，同时也就求解了量子力学中角动量、谐振子和氢原子等重要问题。第六章讲述点群，求得32种点群及其双群的不可表示。第七章介绍空间群表示的基本概念。

各章附有适量习题，建议读者认真完成，以便切实掌握本书内容。

本书设想读者已掌握量子力学和线性代数的基本内容。这里把量子力学中完整力学数量组的概念引伸到群论中，转化为决定群表示的完备算符集。用读者熟悉的语言处理新课题，使之便于理解和掌握。不仅如此，还把量子力学中已经解决的角动量、谐振子和氢原子等重要问题，重新从群论的角度来处理，学习群论后对量子力学的掌握可达到更深的层次。它为我们应用群论方法探索更广泛的物理问题展示出有希望的前景。

本书是群论的初级教材，由于篇幅和学时所限，一方面问题的阐述只得适当从简，另一方面对李代数等的专门深入课题只能忍痛割爱，望读者见谅。

由于作者的水平和时间所限，本书一定存有不少缺点和错误，敬希读者指正。

在本书的完成过程中，得到吉林大学理论物理方面的教师和同学的热情关怀和大力帮助，特别是王成新和李长武同学参加一些计算工作，在此谨致谢意。

朱诚久

1993.6.10

目　　录

引　　言

群论是与对称性相关的数学．而在物理学中存在广泛的对称性，这就使群论和物理学有了密切的联系，使物理学家对群论产生极大的兴趣．

什么是对称性？一切对称性产生于事物的不可区分性或某些基本量的不可观测性，对称是指整体事物的不同部位具有相同的性质或属性．例如四面墙壁完全相同的房间有四面对称，只有看到太阳或用指南针才能在屋内辨认出东南西北四个方向．又如球体对称是指球的界面在各方向都与球心具有相同的距离．

什么是物理学中的对称性？物理学包括物理概念和物理定律，它们用物理量的表达式和方程式表述出来．在它们的表达形式或物理现象中往往具有十分重要的对称性特点，这就是物理学中的对称性．对称性有时体现物理定律的某一侧面，有时隐含于物理定律中．物理定律丰富了对称性的内含，又可以从探究对称性角度揭示物理定律，可以说认识对称性是掌握物理定律的重要关键和建立物理定律的开路先锋．

为了理解物理学中的对称性，我们还是从具体的问题出发．例如惯性定律本身就体现出物理学中的对称性．惯性定律告诉我们，对不同的惯性系物理定律是相同的，或物理定律对坐标系的变换是不变的．它反映物理定律与所选时间和空间的起点无关，对不同的起点它们是相同的．这种对称性就是时空的均匀性．在力学问题上，时空均匀性表现为自由粒子的拉格

朗日函数 L 不能与坐标 $\boldsymbol{r}=x_1\boldsymbol{i}+x_2\boldsymbol{j}+x_3\boldsymbol{k}$ 及时间 t 有关，而只能与速度 $\boldsymbol{v}=\dot{\boldsymbol{r}}$ 有关，但又不能与速度的方向有关. 这时最简单的函数 L 只能是

$$L = L(v^2) \tag{1}$$

它满足

$$\frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{2}$$

$$\frac{\partial L}{\partial t} = 0 \tag{3}$$

体系的拉氏方程为

$$\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}\tau}\left(\frac{\partial L}{\partial \dot{x}_i}\right) - \frac{\partial L}{\partial x_i} = 0, \qquad i = 1, 2, 3 \tag{4}$$

当 $\boldsymbol{v}$ 换为 $\boldsymbol{v}'=\boldsymbol{v}+\boldsymbol{\varepsilon}$，$(\varepsilon \ll v)$

$$L' = L(v'^2) = L(v^2) + \frac{\partial L}{\partial v^2}2\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} \tag{5}$$

当 L' 和 L 仅相差时间函数的全微商 $\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t}$ 时，才能有相同的拉氏方程，这要求

$$\begin{aligned}\frac{\mathrm{d}f}{\mathrm{d}t} &= \frac{\partial L}{\partial v^2}2\boldsymbol{v}\cdot\boldsymbol{\varepsilon} \\ &= 2\frac{\partial L}{\partial v^2}\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\frac{\mathrm{d}\boldsymbol{r}}{\mathrm{d}t} \\ &= \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\left(2\frac{\partial L}{\partial v^2}\right)\boldsymbol{\varepsilon}\cdot\boldsymbol{r}\end{aligned} \tag{6}$$

为此，必须有

$$2\frac{\partial L}{\partial v^2} = m = \text{常数}$$

即

$$L = \frac{m}{2}v^2$$

这就是自由粒子运动的拉格朗日函数，它由对称性要求而确定.

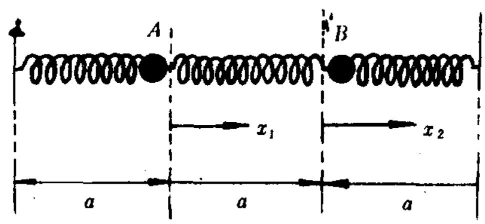
群论是代数的一个分支，包括有限群和 连续群. 它刚好在十九世纪末，奠定了基础. 量子力学出现以前，它在物理学中几乎没有什么应用，以至于那时数学家们感到他们终于找到了对自然科学毫无应用的数学分支.

然而，事隔不久，1925 年量于力学出现以后，逐渐认识到它对物理学的应用价值. 不过在初期还没有认识到群论对解决物理问题的重要性，Condon 等著《原于光谱理论》，是应用量子力学的名著，在这里根本没有提到群论方法，但不久发现它是不用群论的群论(group theory without group)，这就是说，实质上应用了群论.

正是 Wigner 等首先认识到应用群论方法处理问题的重要性，用它常常可以巧妙地以简单的方法解决复杂的物理问题. 50 年代以后完全肯定了群论对物理学应用的价值. 近 30 年群论在物理学中大放异彩. 许多物理学的重要进展与群论相关，很多与群论相关的课题获得诺贝尔奖金. 如李政道和杨振宁的宇称不守恒规律，Gell-man 的基本粒子的 $SU(3)$对称，以及弱电统一理论.

群论如何帮助我们解决物理问题，能帮助我们解决哪些物理问题？现举例给以说明.

例 1 两个质量为 M 的粒子，用三个原长为 a 的弹性常数为 λ 的弹簧如图所示那样连接. 设两墙之间的距离为 $3a$，求振动的简正频率.



解：选离一平衡位置的距离为两个粒子的坐标. 其动能和

位能为

$$T = \frac{1}{2}M(\dot{x}_1^2 + \dot{x}_2^2)$$

$$V = \frac{1}{2}\lambda[x_1^2 + x_2^2 + (x_2 + x_2)^2]$$

它们相对于 x_1 和 x_2 的交换是不变的. 运动方程为

$$M\ddot{x}_1 = -\lambda x_1 - \lambda(x_1 + x_2)$$

$$M\ddot{x}_2 = -\lambda x_2 - \lambda(x_1 + x_2)$$

将两个方程相加和相减，令 $Q_1 = x_1 + x_2$，$Q_2 = x_1 - x_2$ 则有，

$$M\ddot{Q}_1 = -3\lambda Q_1, \qquad M\ddot{Q}_2 = -\lambda Q_2$$

其解为 $Q_i \approx \cos\omega_i t$，其中 $\omega_1 = (3\lambda/M)^{\frac{1}{2}}$，$\omega_2 = (\lambda/M)^{\frac{1}{2}}$. ω_i 即为简正频率. 而 $x_1 = \frac{1}{2}(Q_1 + Q_2)$，$x_2 = \frac{1}{2}(Q_1 - Q_2)$.

我们选取坐标 Q_1 和 Q_2 使问题很容易求解，这是因为坐标 Q_1 和 Q_2 有简单的变换性质. 令 $\sigma x_1 = x_2$，$\sigma x_2 = x_1$，则 $\sigma Q_1 = Q_1$，$\sigma Q_2 = -Q_2$. 其中 σ 为算符，有群的性质.

群论能帮助我们选择对称性好的坐标，以使问题便于解决. 这个简单的例子也许还不足以说明问题，对于复杂的问题才能使优越性看出来. 例如 NH_3 分子，有 4 个原子、12 个自由度，利用对称性分析知道它只有两个小振动运动.

例 2 对各向同性三维谐振子，从二次量子化表象

$$H = h\omega\left(a_1^+ a_1 + a_2^+ a_2 + a_2^+ a_2 + \frac{3}{2}\right)$$

$$[a_i, a_j^+] = \delta_{ij}$$

$$[a_i, a_j] = [a_i^+, a_j^+] = 0$$

根据群论，找到

$$[H, L_i] = 0$$

$$L_i = a_j^+ a_k - a_k^+ a_j$$

其中 i，j，k 依序分别取 1，2，3. 还有

$$[H, U_{ij}] = 0$$

$$U_{ij} = a_i^+ a_j$$

由此选出完整力学数量组，完全确定波函数和能级. 当然这里有多种不同的选法，得到有不同物理意义的状态.

例 3　求粒子在一维势 $V(x)=V(-x)$ 中的运动.

因为

$$H\psi(x) = E\psi(x)$$

所以有

$$H\psi(-x) = E\psi(-x)$$

$\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 有相同的能量. 假如没有退化，则 $\psi(x)$ 和 $\psi(-x)$ 是相同的物理态. $\psi(-x)=C\psi(x)$，C 为常数. 由此也有 $\psi(x)=C\psi(-x)$，从而有 $\psi(x)=C^2\psi(x)$. 必有 $C^2=1$，$C=\pm1$. 因此 $\psi(x)$ 不是奇函数就是偶函数，而不是它们的混合. 函数的这种奇偶性称为宇称. 当有退化时，则 $\psi(-x)=C\psi(x)$ 不可能，但 $\psi_{1,2}=\frac{1}{\sqrt{2}}[\psi(x)\pm\psi(-x)]$ 分别是偶函数或奇函数. 奇偶函数与对称性相关.

我们知道跃千几率与积分

$$I = \int_{-\infty}^{\infty} \psi_f(x) g(x) \psi_i(x) \mathrm{d}x$$

的平方成比例，这里 ψ_f 是终态，ψ_i 是初态. $g(x)$ 代表相互作用. 当被积函数是奇函数时，积分为零. 因此如果 $g(x)$ 是偶函数，仅当 ψ_f 和 ψ_i 为相同宇称时，I 才不为零；反之当 $g(x)$ 为奇函数时，终态和初态有相反宇称，I 才不为零.

从上述例子我们初步可以看到，群论通常能帮助我们处理下列问题：

(1) 帮助我们选择对称性好的坐标，以使我们得到运动方程的解，或求得运动积分.

(2) 帮助我们选择完整力学数量组，以完全确定波函数.

(3) 按对称性编排波函数，以便计算矩阵无，可能得出选

择定则或按 Wigner-Eckart 定理方便地计算矩阵元.

(4)给出物理问题的群论模型哈密顿量. 实际问题通常不具有某种严格对称性，而仅有一些近似对称性，这些近似对称性可用一定的群论模型来代表. 再把非对称部分的效应用摄动理论做处理.

也许会有人认为群论帮助我们解决的问题，不用群论也都可解决. 这似乎否定了群论的价值. 事实上，同样的说法也适用于微积分和力学，最初牛顿求解力学问题根本没有用微积分. 而现在却不同，几乎所有的力学问题都用微积分方法去求解，甚至静力学问题都不例外. 现在越来越清楚地看到，群论与量子物理的关系就象微积分和经典力学的关系同样密切.

现在我们知道量子力学的主要可解问题都可以通过群论方法求解,如角动量算符的本征函数是 $SU(2)$群的表示；类氢原子的能级可由 $O(4)$群得到，三维谐振子态是 $U(3)$群的解. 按群论方法处理问题可使各种问题的处理方法统一起来，并且步骤简单明确.

物理学的许多前沿阵地都与群论有密切关系，基本粒子大统一理论得到了实验初步证明，规范场理论正在发展，群论帮助了物理学，同样物理学也为群论提出了不少新课题. 互相促进，共同发展.

群论在物理学中的作用与地位，现在人们已了解得十分清楚. 过去由于这一点不明确. 在教学中不把群论方法做为物理学基础内容来看待，把量子物理的内容和群论方法割裂开，影响了解决物理问题能力的培养.

过去群论的两大部分即有限群和连续群处理问题的方法还不太统一，影响了物理学者对它们的掌握. 现在有了本征函数法做为有限群表示的新途径，把群表示论和量子力学更加统一起来，使我们更容易掌握.

群论的内容很丰富，限于时间和水平，本书只讲最基本最

主要的内容．为进一步深入掌握它，并在今后工作中应用它奠定基础．

第一章　群的基本概念

1.1　集　　合

集合是现代数学中一个十分重要的基本概念，在群论中也要经常用到这一概念. 有关集合的讨论，早已形成数学中的一个独立的分支——集合论. 我们在这里只简略介绍其中与群论有关的一些基本概念和知识.

一、集合和元素

关于集合，历史上曾有过各种各样的定义. 我们将集合定义为：

凡是具有某种性质的、确定的、有差异的事物的全体就是一个集合(set)，或简称为集.

以上定义中的“事物”可以是各种绝然不同的对象；然而在同一集合中的对象必须具有相同的性质. 集合的例子俯拾皆是，例如：

具有五十四张牌的一付扑克；

一个代数方程的根的全体；

氢原子光谱的全部谱线；

n 维欧氏空间中线性变换的全体；

泡里自旋算符

$$\sigma_x = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_y = \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \sigma_z = \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}$$

一个矩阵中的全部矩阵元；

… … …

可见，它的涵义非常广泛，即可以是一组具体的事物，又可以是数学的运算式或物理学中的算符与操作.

元素 集合中每一个对象个体，我们称为集合的元素(element). 例如一付扑克牌中的某一张牌，氢原子光谱中的某一条谱线等，都是各该集合中的元素. 元素简称为元.

集合常以大写英文字母表示，而它的元素则以小写英文字母表示. 习惯上，我们常以下述方式标记一个集合：

$$S = \{a_1, a_2, \cdots, a_n\}$$

我们采用确定的记号表示元素与集合间的关系. 若元素 a 属于集合 S，我们记为

$$a \in S \quad 或 \quad S \ni a \tag{1}$$

读作"元素 a 属于集合 S". 若 a 不是集合 S 的元素，则记为

$$a \notin S \quad 或 \quad a \overline{\in} S \tag{2}$$

有限集与无限集 只含有有限个元素的集合称为有限集(finite set)，含有无限个元素的集合称为无限集(infinite set). 一个集常标记为

$$A = \{x \,|\, P(x)\}$$

x 为集合 A 的元素，$P(x)$代表元素 x 所具有的某种性质.

子集 集合 A 的全部元素都属于集合 B，则称集合 A 是集合 B 的子集(subset)，或者说集合 B 包含集合 A，记为

$$A \subset B \qquad 或 \qquad B \supset A \tag{3}$$

相反，若集合 A 不是集合 B 的子集，则记为

$$A \not\subset B \qquad 或 \qquad B \not\supset A \tag{4}$$

上面的定义中，包含了两种不同的情况，为了区分这两种不同的情况，我们先定义两集合的相等(或相同). 集合 A 与集合 B 相等，是指两集合有相同数目的元素，且一一对应相等，此时记为