"十二五"国家重点图书出版规划

物理学名家丛书

群论及其在固体物理中的应用

Group Theory and Application in Solid State Physics

（第二版）

徐婉棠　喀兴林　编著

高等教育出版社

“十二[redacted]划

物 理 学 名 家 丛 书

群论及其在固体物理中的应用

QUNLUN JI QI ZAI GUTI WULI ZHONG DE YINGYONG

Group Theory and Application in Solid State Physics

（第二版）

徐婉棠　喀兴林　编著

高等教育出版社·北京

内容提要

本书是在第一版的基础上修订而成的。

全书共分为八章。前两章讨论有限群及其表示的基本数学理论；第三、第四章讨论点群在分析晶体宏观性质中的应用；第五章讨论群论与量子力学的关系；第六章讨论空间群的不可约表示及其在能带理论中的应用；最后两章介绍晶格动力学中的群论方法，色群及其表示理论。全书内容详尽，结构完整，特别是针对固体物理学中的问题讨论了群的性质和应用，有助于读者有效地应用群的知识，简洁地处理有关计算问题。

本书可作为理科硕士研究生和高年级本科生的教材，亦可供有关科研人员参考。

图书在版编目(CIP)数据

群论及其在固体物理中的应用 / 徐婉棠，喀兴林编著.--2版.--北京：高等教育出版社，2016.8

(物理学名家丛书)

ISBN 978-7-04-045141-2

Ⅰ.①群… Ⅱ.①徐… ②喀… Ⅲ.①群论-应用-固体物理学 Ⅳ.①O48

中国版本图书馆CIP数据核字(2016)第077453号

策划编辑 程福平　责任编辑 程福平　封面设计 杨立新　版式设计 王艳红
插图绘制 杜晓丹　责任校对 窦丽娜　责任印制 朱学忠

出版发行	高等教育出版社	网　址	http://www.hep.edu.cn
社　址	北京市西城区德外大街4号		http://www.hep.com.cn
邮政编码	100120	网上订购	http://www.hepmall.com.cn
印　刷	北京信彩瑞禾印刷厂		http://www.hepmall.com
开　本	787mm×960mm　1/16		http://www.hepmall.cn
印　张	25.75	版　次	1999年6月第1版
字　数	490千字		2016年8月第2版
购书热线	010-58581118	印　次	2016年8月第1次印刷
咨询电话	400-810-0598	定　价	53.00元

本书如有缺页、倒页、脱页等质量问题，请到所购图书销售部门联系调换

物 料 号　45141-00

徐婉棠，北京师范大学物理系副教授，硕士生导师，主要从事半导体能带及杂质能级的研究。于 1985—1986 年到美国休斯敦大学物理系作访问学者，进入半导体热电子输运的理论研究领域。1987 年癌症手术后，逐渐退出科学研究，专门从事教学工作，承担了为本科生的“半导体物理”及研究生的“群论及其在固体物理中的应用”两门课程，主编了《固体物理学》《群论及其在固体物理中的应用》两本教材。

喀兴林，北京师范大学教授，蒙古族人，祖籍甘肃，1929 年 6 月生于吉林省吉林市。1951 年毕业于北京师范大学物理系本科，毕业后留校任教。曾任中国物理学会理事，《大学物理》杂志副主编。毕生从事理论物理的教学工作，1994 年退休，著有《高等量子力学》一书。

《物理学名家丛书》编委会

"十二五"国家重点图书出版规划

物理学名家丛书

978-704031147-1	半导体微纳电子学	夏建白
978-704031205-8	物理学中的群论	陶瑞宝
978-704019898-0	量子统计物理学	杨展如
978-704021960-9	现代天体力学导论	孙义燧 等
978-704009925-6	高等量子力学(第二版)	喀兴林
978-704011576-5	固体理论(第二版)	李正中
978-704045141-2	群论及其在固体物理中的应用(第二版)	徐婉棠 喀兴林
978-704041823-1	量子场论	段一士

前　言

群论是固体物理类和材料科学类各专业及化学有关专业攻读硕士学位研究生必须学习的课程，本书就是为该课程而编写的教材。本书不仅涉及一般的数学理论，还特别着重讨论群论在固体物理中的各种应用以及固体物理中要用到的各种群的性质，其起点是大学本科物理专业的量子力学和固体物理两课的知识，所以为更好地学习本书的后半部分，在学习本书的同时最好同步学习固体理论课程。

本书第一、第二章讨论有限群及其表示的基本数学知识，在讲述中尽量避免过分数学化。在群的表示理论中根据群代数的思想引入了群元空间、表示矢量和类矢量等概念，从而较为简洁地证明了一些重要的定理，还讨论了特征标表的构造和不可约表示基函数的性质以及利用投影算符寻求表示基函数的方法。

第三章详细讨论了转动群及其不可约表示，从而使双群出现的物理和数学基础更为清楚。在讲述中有意地尽量不引用连续群的数学理论。在第四章中全面地讨论了32个晶体点群的构造、性质和特征标表，并对晶体点群只有32个这一点作了数学证明，最后给出了点群在分析晶体的宏观性质及分子振动谱时的应用。

第五章指出了群论在简化量子力学计算、定性地确定系统能级的简并度和跃迁的选择定则等方面的应用。第六章详细地讨论了空间群及其表示理论，并介绍了在分析能带的对称性质与能带计算中的应用。第七章进一步介绍了晶格动力学中的群论方法。最后，第八章介绍了含有反幺正算符的色群及其表示理论。

1979年，中国科学院和教育部联合在昆明举办了“全国晶格动力学讨论班”，在班上喀兴林系统地讲授了群论，当时所用的讲义就是本书第一至第五章的第一稿。后来徐婉棠对此进行了改写和补充，并增写了第六、第七、第八三章，作为北京师范大学研究生课的讲义，并讲授多次，其间又经两次较大的改写，最后又彻底地重写了，并由徐、喀二人共同定稿。

由于作者的水平，特别是数学水平有限，书中难免有不妥甚至错误之处，热诚希望广大读者不吝指出，以便改正。

徐婉棠　喀兴林

2016年2月于北京师范大学

主要符号表

$\boldsymbol{a}_1$、$\boldsymbol{a}_2$、$\boldsymbol{a}_3$	晶格原胞的基矢
a_j	约化系数
$\overleftrightarrow{A}$	并矢
$\boldsymbol{b}_1$、$\boldsymbol{b}_2$、$\boldsymbol{b}_3$	倒格子的基矢
$c_{nr}, c(r, \varphi)$	绕 r 轴转过 $\varphi = \dfrac{2\pi}{n}$ 角
C_j	第 j 类
$\boldsymbol{C}_j$	类矢量
$\tilde{\boldsymbol{C}}_j$	类和矢量
D_G	群 G 的表示
$D\Gamma$	色群的共表示
D_G^{disp}	群 G 的位移表示
$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} l & l' \\ \kappa & \kappa' \end{pmatrix}$	力矩阵的矩阵元
$D_{\alpha\beta}\begin{pmatrix} & \boldsymbol{q} & \\ \kappa & & \kappa' \end{pmatrix}$	动力学矩阵的矩阵元
$\boldsymbol{e}_j$	力矩阵的本征矢
$e_\alpha\left(\begin{matrix} l \\ \kappa \end{matrix}\middle\vert j\right)$	$\boldsymbol{e}_j$ 的分量
$\boldsymbol{e}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ j \end{pmatrix}$	动力学矩阵的本征矢
$e_\alpha\left(\kappa\middle\vert\begin{matrix} \boldsymbol{q} \\ j \end{matrix}\right)$	$\boldsymbol{e}\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ j \end{pmatrix}$ 的分量
E	单位元(恒等元)
G	群
G_0	空间群 G 的点群
$G(\boldsymbol{k})$	波矢群

$G_0(\boldsymbol{k})$	波矢点群
g	群 G 的阶
g_0	G_0 的阶
$g(\boldsymbol{k})$	波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的阶
$g_0(\boldsymbol{k})$	波矢点群 $G_0(\boldsymbol{k})$ 的阶
H	群 G 的子群
$\hat{H}$	哈密顿算符
i	虚数单位 $\mathrm{i}=\sqrt{-1}$
I	中心反演
$\overleftrightarrow{I}_0$	单位并矢
$\boldsymbol{k}$	波矢量
$\boldsymbol{G}_m$	倒格矢
$\boldsymbol{M}$	磁(色)群
N	晶体的原胞数
O_R	旋量函数的变换算符
P_R	标量函数的变换算符
$P^i_{\alpha\beta}$	投影算符
$P^i_{\alpha\alpha}$	准投影算符
P^i	特征标投影算符
Q	使 $\boldsymbol{k}$ 变换到 $-\boldsymbol{k}+\boldsymbol{G}_m$ 的群元
q_j	简正坐标
$Q\begin{pmatrix}\boldsymbol{q}\\ j\end{pmatrix}$	复简正坐标
R	群元
$\overleftrightarrow{R}$	与转动 R 相应的并矢
$\boldsymbol{R}$	群元空间的基矢
$\boldsymbol{R}_n$	格矢
$\boldsymbol{r}\begin{pmatrix}l\\ \kappa\end{pmatrix}$	第 l 个原胞中第 κ 个原子的位矢
S	群元、非正当转动算符
$\boldsymbol{S}$	群空间的基矢
$\hat{\boldsymbol{S}}$	自旋角动量算符

S	子群、正规子群
s	子群 S 的阶
s_z	自旋的 z 分量
$\boldsymbol{t}_1$、$\boldsymbol{t}_2$、$\boldsymbol{t}_3$	晶格单胞的基矢
T	时间反演算符、动能算符
$\boldsymbol{T}$	平移群
$\boldsymbol{T}(\boldsymbol{k})$	波矢 $\boldsymbol{k}$ 的平移群
$\boldsymbol{u}\begin{pmatrix} l \\ k \end{pmatrix}$	第 l 个原胞中第 k 个原子偏离平衡位置的位移矢量
V	反对称算符,势能
$\boldsymbol{V}^{(i\alpha r)}$	表示矢量
$\boldsymbol{W}$	约化位移
$\eta\begin{pmatrix} \boldsymbol{q} \\ j \end{pmatrix}$	实简正坐标
σ	镜面反射,电导率
$\hat{\boldsymbol{\sigma}}$	泡利矩阵
σ_{h}	水平镜像
σ_{v}	垂直镜像
σ_{d}	平分两水平轴交角的垂直镜像
χ	特征标
Γ	布里渊区的中心点
Γ_G	群 G 的表示

目　　录

第一章　群的基本概念

§1.1　群

一、群的定义及其基本性质

有限或无限个数学对象(称为元或元素)$A,B,C,\cdots$的集合$\{A,B,C,\cdots\}$,其中有一个与次序有关的运算方法(称为**群乘**),能从集合中任意两个元A、B得出确定的元C(记为$AB=C$),若满足下列四个条件,则这一集合称为**群**,用G表示,集合中的元素称为**群元**.

(1) 封闭性:集合中任意两个元的乘积(包括自身相乘)都在此集合之内;

(2) 满足结合律:

$$A(BC)=(AB)C \tag{1.1-1}$$

(3) 存在单位元:集合中存在单位元E,使集合中的任意元A有

$$EA=AE=A \tag{1.1-2}$$

(4) 集合中每一元A有逆元A^{-1}存在,满足

$$A^{-1}A=AA^{-1}=E \tag{1.1-3}$$

以上就是群的定义.

群元的数目称作**群的阶**,记作g.若g为有限,则称作**有限群**,否则就是**无限群**.在无限群中,若群元的数目是可数的无穷多,则称作**离散的无限群**;若群元的数目是不可数的无穷多,则称作**连续群**.本书主要讨论有限群.

群乘是将集合中的任两个元构成唯一的另一个元的一种运算,所以,群乘不一定是通常的代数运算中的乘法.群乘不一定满足交换律,即$\forall A_i,A_j\in G,A_iA_j=A_jA_i$不一定成立.如果上式成立,则这个群就称作**交换群**或**阿贝尔群**.

由群的定义,可以得到群的几个基本性质.

(1) 单位元E的逆元仍为单位元本身.因为E的逆元为E^{-1},根据逆元的定义式(1.1-3),有

$$E^{-1}E=EE^{-1}=E$$

由单位元的定义式(1.1-2),有

$$EE^{-1}=E^{-1}E=E^{-1}$$

将上面两式相比,即得

$$E^{-1}=E \tag{1.1-4}$$

（2）逆元的逆就是群元本身，即 A 的逆元为 A^{-1}，而 A^{-1} 的逆元为 A. 因为

$$\begin{aligned}(A^{-1})^{-1} &= (A^{-1})^{-1}E = (A^{-1})^{-1}(A^{-1}A) \\ &= [(A^{-1})^{-1}A^{-1}]A = EA = A\end{aligned}$$

所以

$$(A^{-1})^{-1}=A \tag{1.1-5}$$

（3）乘积的逆元为

$$(AB)^{-1}=B^{-1}A^{-1} \tag{1.1-6}$$

因为

$$\begin{aligned}(AB)^{-1} &= (AB)^{-1}E = (AB)^{-1}AEA^{-1} \\ &= (AB)^{-1}A(BB^{-1})A^{-1} \\ &= [(AB)^{-1}(AB)]B^{-1}A^{-1} = EB^{-1}A^{-1} = B^{-1}A^{-1}\end{aligned}$$

同样可以证明下式成立：

$$(AB\cdots FG)^{-1}=G^{-1}F^{-1}\cdots B^{-1}A^{-1} \tag{1.1-7}$$

二、列举若干个具体群[2][5][11]

1. 取“数学对象”为普通的数.

（1）全部正、负整数（包括零）的集合：群乘为代数的加法运算，单位元为零，任意群元为 $A=n$，其逆 $A^{-1}=-n$. 这是一个无限的阿贝尔群.

（2）全部正、负实数的集合：群乘为数乘，单位元是 1，任意元 $A=n$，其逆 $A^{-1}=1/n$. 当 $n\neq 0$ 时，$1/n$ 在集合内；当 $n=0$ 时，$1/n$ 不在集合内. 因此，这个集合不是群.

（3）如果将 0 从（2）的数集中去掉，这样的数集就构成群. 因为，这样一个集合中的任意两个元的乘积都不是 0，而是这个集合中的某一个确定的数. 所以，这个集合具有封闭性，且存在单位元、逆元，因此这个数集就是一个群. 而且也是一个阿贝尔群.

（4）集合 $\{1,-1\}$ 在数乘运算下构成一个群；集合 $\{1,-1,\mathrm{i},-\mathrm{i}\}$（$\mathrm{i}=\sqrt{-1}$）亦构成群，这个群中的各个元是由（$\mathrm{i}^k$）构成的，其中 $k=0,1,2,3$. 如果一个群的所有群元可以由某个元的幂来产生，那么这类群就称作**循环群**. $\{1,-1,\mathrm{i},-\mathrm{i}\}$ 就是一个循环群. 显然，循环群都是阿贝尔群.

2. 取“数学对象”为方矩阵.

（1）全部 $n\times n$ 矩阵. 群乘为矩阵乘法，单位元就是单位矩阵. 由于这个 $n\times n$ 矩阵的集合中亦包括了降秩方阵（$\det \boldsymbol{A}=0$），而这种方阵是不存在逆矩阵的，所以这样的集合不构成群.

（2）群乘为矩阵乘法，满足 $\det \boldsymbol{A}\neq 0$ 的全部 $n\times n$ 矩阵的集合构成群；满足 $\det \boldsymbol{A}=\pm 1$ 的全部 $n\times n$ 矩阵的集合亦构成群；满足 $\det \boldsymbol{A}=+1$ 的全部 $n\times n$ 矩阵也

构成群;但满足 $\det \boldsymbol{A}=-1$ 的全部 $n\times n$ 矩阵不构成群.因为 $\det(\boldsymbol{AB})=\det\boldsymbol{A}\cdot\det\boldsymbol{B}=(-1)\cdot(-1)=1$,表明若 $\boldsymbol{A}$ 及 $\boldsymbol{B}$ 都在集合中,但它们的乘积 $\boldsymbol{AB}$ 却不在集合中,这个集合不具有封闭性,所以不是群.

(3) 群乘为矩阵乘法,满足 $\det\boldsymbol{A}=\pm1$ 的六个 3×3 矩阵的集合:

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&1&0\\0&0&1\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}0&1&0\\1&0&0\\0&0&1\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}1&0&0\\0&0&1\\0&1&0\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}0&0&1\\0&1&0\\1&0&0\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}0&0&1\\1&0&0\\0&1&0\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{F}=\begin{bmatrix}0&1&0\\0&0&1\\1&0&0\end{bmatrix}$$

构成一个群,因为集合中任意两个元的乘积就是这六个元中之一,满足封闭性的要求.单位元及逆元都存在,如 $\boldsymbol{B}^{-1}=\boldsymbol{B}$, $\boldsymbol{D}^{-1}=\boldsymbol{F}$.另外,矩阵的乘法是满足结合律的.这个群称作 d_3 群.

我们把 d_3 群的元之间的乘积排成一个表(如表 1.1 所示).

表 1.1

		(右因子)					
		E	A	B	C	D	F
(左因子)	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

这样的表,明确地给出群的运算规律,称为群的乘法表或简称**群表**.给出群表就完全给定了一个群.

(4) 群乘取矩阵乘法,下面六个 2×2 矩阵也构成一个群.

$$\boldsymbol{E}=\begin{bmatrix}1&0\\0&1\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{A}=\begin{bmatrix}1&0\\0&-1\end{bmatrix}\qquad \boldsymbol{B}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

$$\boldsymbol{C}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&\frac{1}{2}\end{bmatrix}\quad \boldsymbol{D}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&\frac{\sqrt{3}}{2}\\-\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}\quad \boldsymbol{F}=\begin{bmatrix}-\frac{1}{2}&-\frac{\sqrt{3}}{2}\\\frac{\sqrt{3}}{2}&-\frac{1}{2}\end{bmatrix}$$

这个群的乘法表与六个 3×3 矩阵组成的 d_3 群的乘法表相同.

3. 取“数学对象”为对称操作(变换).

对称操作是使具有几何形状的实体自身重合的操作.由对称操作的集合构成的群称作**对称性群**(或**变换群**),相继的两个操作定义为群乘,即 AB 定义为先进行操作 B,接着进行操作 A.

(1) 绕某一固定轴转动任意角度的操作组成的群,称作**轴转动群**.

以 $R(\theta)$ 表示转动 θ 角(按右手螺旋的方向)的操作,绕同一轴转 θ' 角的操作记作 $R(\theta')$,显然,

$$R(\theta')R(\theta) = R(\theta' + \theta)$$

$R(\theta'+\theta)$ 是绕相同轴转动 $\theta'+\theta$ 角的操作,是绕该轴转动操作的集合中的一个元. $R(\theta)$ 的逆就是绕同一轴转过 $-\theta$ 角(亦即按左手螺旋方向转过 θ 角)的操作,即 $R^{-1}(\theta)=R(-\theta)$.

轴转动群是无限的阿贝尔群.

(2) 使正三角形自身重合的对称操作构成群.

如图 1.1 所示的正三角形,有六个转动操作可以使之自身重合.分别绕 A、B、C 轴转动 π 角的操作,记作 A、B、C;绕垂直于三角形平面的轴逆时针转动 $2\pi/3$ 角的操作记作 D;F 则是绕相同的轴按顺时针方向转动 $2\pi/3$ 角的操作;不动操作 E 则是单位元.

将上述六个操作之间的群乘关系列成表,可以看出,这六个操作的集合具有封闭性,存在逆元,群乘满足结合律,因此构成群,这个群称作 D_3 群,其群表如表 1.2 所示.

表 1.2

	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

如果考虑到中心反演 I(I 是空间反演操作,即将 $\boldsymbol{r}$ 变或 $-\boldsymbol{r}$ 的变换)的操作,那么使正三角形(或正三角柱)自身重合的操作可以这样来选取.其中坐标系的选取如图 1.2 所示,Oz 轴垂直于纸面,另有四个轴 OA、OB、OC、OD 与 Oz 轴垂直