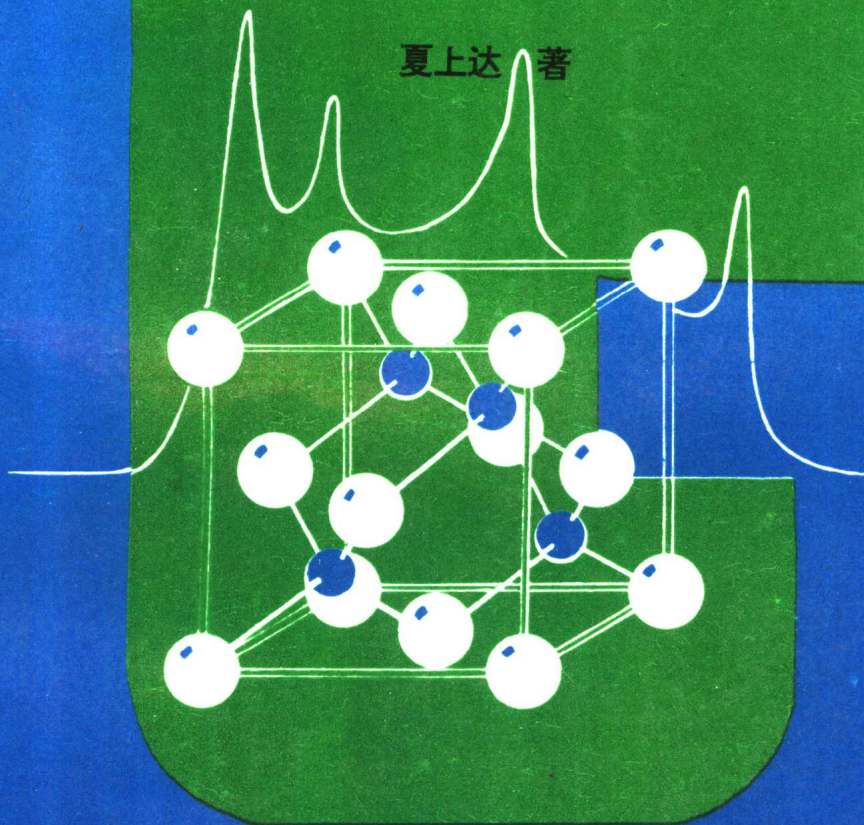


群论与光谱

夏上达 著



科学出版社

内 容 简 介

本书以应用群论的方法和成果为目的来阐述群论和光谱。内容除有限群及其表示、李群基础、群论在量子力学中的应用原则外,还讨论了拉卡群和代数、分子点群、晶体点群和空间群,以及它们分别在复杂原子光谱、晶场光谱和波谱、晶体光谱中的应用。讨论了这些光谱所涉能级、谱强和选择律、谱形等及其分析方法。

本书叙述注重概念、方法、数学和物理概念的密切联系,强调物理概念的准确性。不仅旨在正确理解和使用已有的各种分析方法、群论和张量算符表册,而且也为进一步学习各种光谱理论奠定必要的基础。除部分内容可用为有关专业研究生或高年级大学生的群论教材外,对象主要是物理、化学、材料科学、光学等领域中从事各种光谱、波谱,乃至核谱工作的实验和实际工作者。

群论与光谱

夏上达 编著

责任编辑 刘洪楷 周 华 金少刚

科 学 出 版 社 出 版

北京东黄城根北街16号

邮政编码:100717

吉林省科技印刷厂印刷

*

1994年6月第一版 开本:850×1168 1/32

1994年6月长春第一次印刷 印张:14.375

印数:0001—2000 字数:322 000

统一书号:ISBN 7-83-004354-5/0·753

定价:14.50元

序

中国科学技术大学物理系夏上达教授从事教学与科研有年。他的科研专长在固体发光学。以在科研教学中积累的心得,他编著了《群论与光谱》一书。这是他从事固体光谱(特别是晶场光谱)多年的理论分析研究的结晶。

这本书是运用群论的方法及其研究成果阐述群论与光谱这一学科,重点放在基本概念、方法和理解使用,注意到数学语言和物理概念的密切联合,强调物理概念的正确性。

群论原出于数学的一支,但当它一经与物理学或其它学科相结合,它的效用于是扩大了。群论的数学本身也有所发展。

群论的应用主要开发已知的对称性,可以简化数值计算之繁,转而能从中获得明确的定性结论。所有原子、分子现象都属此范畴。光谱是原子、分子运动的表示之一种,光谱学自是群论用武之地。

说来群论闯入光谱学中也不算迟。在 Condon 和 Shortley 合著的《原子光谱理论》书中说了一段小故事:1928 年狄喇克(Dirac)在普林斯顿作一次学术报告,题为“自旋变量与能量交换”,怀尔(Weyl)提出问题说:“报告人曾说不用群论可推导出这些结果来的”。狄喇克回答说:“我得出的结论确没有用前所已知的群论概念啊”。这是群论上的名言:“没有群论却有了群论”。

现在不单在核外物理中运用群论,就在核物理领域内运用量子力学时,也有群论的足迹。这是学科与学科之间相结合从而产生新学科的必然结果。科学的发展没有终止之日。宇宙不灭,科学发展无终结。

谨以此语写于《群论与光谱》书端以为序。

钱临照书

1991.4.9

前 言

群论和群表示论作为描述和体现物质系统对称性的数学工具,近几十年来已广泛深入地融合应用于物理学和化学,特别是描述物质微观结构和微观运动规律的量子理论中。因而,掌握群论的概念、方法和已有成果,已经成为广泛而迫切的需求,高等院校有关专业也已将群论列为研究生必修课或高年级学生的选修课。不难想像:由于近代科学中各种各样的“谱”常常就是微观“量子性”的直接反映,所以,群论对各种谱学尤为重要、甚至不可或缺;反过来,对于谱的分析研究也是群论应用的典型领域。光谱就是一个突出的例子。

作者在中国科技大学物理系研究生班、高年级专业班和其它场合多次讲授过群论以及群论对光谱的应用,并作为固体光学专业教师与主要从事实验光谱学研究的同事们密切配合,从事过固体光谱(特别是晶场光谱)的多年理论分析研究。本书是在这些教学和科研体验的基础上写成,尝试以应用群论方法和成果为目的来阐述群论和光谱。因而,叙述力求做到概念和方法清晰、数学和物理联系密切而准确,并引向正确理解和使用已有的群论和张量算符表册,也希望能提供一个进一步学习各种光谱理论的基础。书中对于篇幅较大的证明,均标以<证明>和<证完>将其限定框划出来,以便读者选择阅读。对初学者建议先略去证明不看。

本书假定读者已学过量子力学和原子物理,也学过一些线性代数。头两章主要介绍有限群及其表示,并以关于水分子的正则振动的较详细分析作为它们在(经典)物理学中应用的典型示例。第三章通过延伸量子力学角动量理论,初步介绍李群、李代数基础概念并以球对称群为例。¹⁾写这一章,一方面意在讲一点连

1) 关于角动量和第四章第五节的球张量理论本身的某些部分,凡是量子力学教程一例如[3]已讲过的,都避免重复并注意了衔接。

续群初步,一方面是为了给第五章作个准备。凡是对李群及第五章不感兴趣的读者,可以只从第三章的举例中了解到群 $SO(3)$ 、群 $SU(2)$ 的有关定义及它们的关系,就可没有困难的阅读第四章,以了解群表示论在量子力学中的应用原则,从而完成关于群论、群表示论及其应用原则这些基本内容的学习。

本书其余各章分别介绍复杂原子、分子和络离子、晶体的光谱及群论在其中的应用,读者可选择使用。第五章讲拉卡群和拉卡代数对分析复杂原子光谱的应用,引向正确理解和使用文献[9]关于 1^N 组态的光谱系数表;第六章用量子化学中习惯的熊夫利斯符号讲分子点群及其表示。第七章讲晶场光谱和分子光谱。重点在晶场光谱,用到了第五、六章,并对谱的各方面作了较详细分析,也介绍了常用的几种不同表象;第八章讲晶体点群和空间群(用了国际符号并介绍了它与熊夫利斯符号的关系)。这章内容介于晶体学和物理学之间,通常的固体物理书讲了一点,但科研中尚嫌不足,故予以补充并单列一章。第九章讲空间群表示和晶体谱,本章没有引入一般的“分导表示”、“诱导表示”概念,“允许表示”概念的引入也比较直接了当。本章还分别以 2 维的一个点式群和一个非点式群为例,把空间群的完整表示(而不只是“小表示”)的结构和特点显示出来。除讲了空间群表示对电子能带和格波的应用外,也介绍了时间反演不变所引入的附加简并等问题。

因撰稿时间不够充分,如有疏漏之处,敬请读者不吝指正。

作者诚挚感谢中国科学院长春物理研究所“激发态物理”开放实验室和钱临照教授、徐叙瑄教授、许少鸿教授及虞家琪教授等对本书出版的大力支持和积极推荐。我的同事楼立人同志对本书初稿提出了许多宝贵的意见,我的研究生段昌奎在校定此书书中做了许多工作。科学出版社长春编辑室的赵书云同志在此书出版中也给予很大支持。在此一并致谢。

夏上达

一九九一年五月

引 言

客观物质世界复杂多变的現象总是遵循某些基本的规律,从而在其较基本的层次上表现出某些简单性和统一性。这和各种各样的对称性有着深刻的内在联系。就物理学而言,所谓一个物理系统具有某种对称性,通常指该系统的哈密顿量在某种变换(称为对称变换)下具有不变性。一类这种对称变换的集合,常给出数学上的一个(对称变换)群,群论就研究这个集合。因而群论是研究系统对称性质的数学工具。根据群论、特别是群表示论,可以导出对系统的各种定性和定量的结论。这些结论是可靠的,只要所依据的对称性是可靠的。这些结论也是充分一般的,即和该系统的动力学细节无关。同时,对这种对称性的认识也可大大简化有关动力学方面的分析和计算,这对于复杂体系的研究显得尤为重要。

特别在微观物理中,由于研究对象是较为基本的微观物理系统,它们具有更为广泛和一般的对称性。例如所有的电子就其本性来说都是全同的,所有的氧原子亦然,它们是组成各种宏观物体的“基元”。这就给对称性的应用带来更多机会,使对称性的研究更为重要,更富效益;另一方面,量子物理学比经典物理学更为复杂,特别是对于复杂微观系统更须应用对称性来简化处理;再者,微观物理正处于探索未知领域(例如更基本的物质结构层次)的前沿,应用已确立或试探中的对称性作为依据,利用群论来帮助探索基本规律等,业已证明是非常有效的。具体而言,例如:

一、根据对称性来判断和分类标志所研究系统的基本物理量,如守恒力学量,定态波函数。

二、判断过程始末态关系,如选择定则。

三、判断相关物理过程间关系,例如光吸收中圆偏和线偏振光强之比。

四、简化动力学计算,如用所谓对称化匹配波函为基约减需对角化的哈密顿矩阵的维度。

五、在基本粒子研究中探索基本运动方程,分类和预言粒子等。这些都具体说明了上面的论述。

光谱是微观系统(特别是原子、分子、晶体中的电子和原子)在由电磁力主宰的微观能态之间发生量子跃迁时所涉光子的能谱,因而是这些微观能态的直接反映,是用以研究物质微观结构的有力手段。特别是技术上广泛应用的光学材料和光谱分析技术,更离不开光谱的研究。而如上所述,微观状态和过程的研究非常地依赖于群论的应用(例如分子和晶体中电子态的标志就是点群和空间群表示符号,一般量子力学教程没有讲到),所以群论和光谱的关系非常密切。一般接触各种光谱,乃至波谱、能谱、核谱的实验或实际工作者都会有深刻的感受。

本书以应用群论的方法和成果为目的来阐述群论和光谱。除群论和群表示论基础外,重点在原子、络离子、分子和原子簇、固体中的电子态、声子态及有关光谱。

目 录

第一编 群论和群表示论基础	1
第一章 群的基本概念和有限群	1
第一节 群的定义和举例	1
第二节 群的各种子集	5
第三节 直接乘积群	9
第四节 群的同构和同态	10
第五节 群函数和群代数	12
第二章 有限群的线性表示	15
第一节 群的线性表示的定义	15
第二节 群的各种表示及表示矩阵	22
第三节 舒尔定理	27
第四节 有限群的不等价不可约表示	29
第五节 群的直乘表示及直乘群的表示	35
第六节 群的不可约表示矩阵和投影算符	39
第七节 分子振动	44
第八节 实表示和复表示	58
第三章 李群基础	64
第一节 连续(线性矩阵)群	64
第二节 李群的基本性质	67
第三节 李群的表示和李氏定理	75
第四节 李群的表示和李代数	84
第五节 李群的表示矩阵及其特征标	89
第六节 李群的直乘表示及其约化	92
第四章 群论和量子力学	100
第一节 哈密顿对称群和定态波函	100
第二节 直乘表示的约化	106
第三节 对称性降低时表示的约化	108

第四节	力学量算符的性质和选择定则	110
第五节	不可约球张量及魏格纳-艾卡定理	118
第六节	时间反演不变所引入的附加简并	126
第二编 连续群和原子光谱		133
第五章	拉卡代数和复杂原子光谱	133
第一节	拉卡群链 $U_{2l+1} \supset SU_{2l+1} \supset R_{2l+1} \supset R_3$	133
第二节	群 R_{2l+1} 和群 G_2 的根图和表示 — l^N 轨道态分类	139
第三节	双张量算符和高倍数 — l^N 的状态分类	149
第四节	亲态比系数	159
第五节	l^N 组态原子的约化矩阵元	166
第六节	多电子原子能级的光谱拟合	173
第七节	原子光谱的强度	184
第三编 分子点群和原子簇光谱		190
第六章	分子点群及其表示	190
第一节	对称操作和对称素	190
第二节	对称点群	194
第三节	单重主轴对称群及其表示	197
第四节	多重主轴对称群及其表示	205
第五节	双值群及其表示	212
第七章	晶场光谱和分子光谱	216
第一节	立方晶场中 d^N 离子的项能	217
第二节	立方晶场中 d^N 离子的旋轨耦合能	230
第三节	低对称晶场中 d^N 离子的能级	235
第四节	晶场中的塞曼分裂波谱	243
第五节	电子声子耦合和 Jahn-Teller 效应	253
第六节	晶场中的稀土 f^N 离子的能级	262
第七节	晶场中 l^N 组态内跃迁的谱强和 J-O 公式	266
第八节	晶场光谱的声子伴随跃迁	272
第九节	分子轨道、化学键和分子光谱	283
第十节	络离子的分子轨道理论	294

第四编 空间群和晶体光谱	303
第八章 晶体的对称性和空间群	303
第一节 晶格的对称操作	303
第二节 七个晶系一点阵单胞基矢	308
第三节 十四种布拉菲点阵一点阵原胞种类	312
第四节 三十二种晶格对称点群	319
第五节 晶格的封闭和非封闭对称操作	324
第六节 空间群和它的点群	330
第七节 点式空间群	334
第八节 非点式空间群	339
第九节 空间群国际表和晶体结构	347
第九章 空间群的表示和晶体的电子声子谱	357
第一节 平移群的表示	357
第二节 空间群的表示	364
第三节 点式空间群的表示	374
第四节 晶体的电子态和能带	386
第五节 非点式空间群的表示	401
第六节 金刚石型晶体空间群 O_h 的小表示	411
第七节 空间群的双值表示和旋轨分裂	418
第八节 空间群不可约表示和时间反演简并	422
第九节 晶格振动格波	427
第十节 格波模—晶格振动按波矢群表示的约化	433
第十一节 晶体光谱:态密度和选择律	439
附录 I 32 晶体点群的特征标	449
附录 II 230 种空间群	458
参考文献	466

第一编 群论和群的表示论基础

第一章 群的基本概念和有限群

本章介绍群的各种基本概念。这些概念对于有限群和连续群都是基本的。但本章在引入它们时,大多是就有限群情况来表述的。

第一节 群的定义和举例

本节引入群的定义和有关概念,同时举一些简单的例子。

一、群的定义

群 G 是若干元素 $g_i (i=1,2,\cdots)$ 的集合,在这些元素间定义了乘法运算并满足以下四个条件:

1. 封闭性 集合中任意两元素 g_i 和 g_j 的乘积(可以是同一元素的自乘)仍是此集合内一个确定的元素:

若 $g_i \in G, g_j \in G$, 必有 $g_i g_j \in G$

上式中用了符号 $A \in B$ 表示“ A 属于 B ”。

2. 结合律 若 $g_i, g_j, g_k \in G$

则 $g_i (g_j g_k) = (g_i g_j) g_k$

3. 有恒元 $E \equiv g_1$ 对任意群元 $g_i \in G$ 均有

$$E g_i = g_i E = g_i \quad (1.1)$$

4. 均有逆元 对任意群元 $g_i \in G$ 存在其逆元 $g_i^{-1} \in G$ 使

$$g_i^{-1} g_i = g_i g_i^{-1} = E \quad (1.2)$$

式(1.2)表明逆元是相互的。可证这样定义的恒元是唯一的,元素 g_i 的逆元 g_i^{-1} 也是唯一的。

一般言,群元乘积不可对易。若对任意 $g_i, g_j \in G$ 有

$$g_i g_j = g_j g_i \quad (1.3)$$

则该群 G 称为阿贝尔群 (Abelian)。

元素数目有限的群称为有限群, 元素的数目 h 称为有限群的阶。元素数目无限的群称为无限群, 如果其元素可用一组连续参数描写, 则称连续群。

如果一个有限群可写成如下 n 个元素的集合

$$G = \{E, R, R^2, \dots, R^{n-1}\} \quad (1.4)$$

$$\text{其中} \quad E = R^n \quad (1.5)$$

则称 G 为 n 阶循环群。循环群一定是阿贝尔群。

二、群的举例

群元素的物理意义多种多样, 相应的群元乘法的定义也形形色色。

例如, n 个复数

$$e^{i2\pi m/n} \quad (m=1, 2, \dots, n) \quad (1.6)$$

可给出 n 阶循环群, 群元乘法就是复数乘法, 恒元是 1; 所有整数可给出无限(可列)群, 整数加法为群乘法, 恒元为 0; 全部复数可给出连续群, 复数加法为群乘法, 恒元为 0; n 维矢量通过矢量加法(定义为群乘法)也给出一连续群。

现代物理学中应用较普遍的是变换操作(标符, 矩阵)作为群元的群, 群元的乘积定义为相继变换。例如, n 个客体排列次序的变换给出置换群 S_n ; 自然界三维空间的全部旋转构成的连续群 R_3 和由空间反演 $\hat{i}$ 形成的二阶群 $C_i = (E, \hat{i})$ 描述原(离)子的空间对称性; 由有限个旋转和反演(或面反映 $\hat{\sigma}$)形成的分子点群描述分子(或原子簇)的空间对称性, 有限点群和晶格平移联合给出的空间群描述晶体空间结构的对称性。这些都是本书讨论的重点; 此外, 相对论四维时空中旋转变换的罗伦兹(Lorentz)群, 描述各种抽象空间变换的么正矩阵(连续)群等对于核和基本粒子物理的研究早有应用。而某些 n 维么正连续群, 例如拉卡(Racah)定义

的群,对于复杂原(离)子的量子态和光谱的应用已日益普及,本书也要介绍拉卡群和代数的这种应用。

三、有限群的乘法表

可以将有限群元素的乘积排列成群的乘法表,表中的元素是其所在行左侧的元素和所在列顶上元素的乘积,如表 1.1 和表 1.2 所示。表 1.1 的群是四阶循环群 $C_4 = (\hat{E}, \hat{C}_4, \hat{C}_4^2, \hat{C}_4^3)$, 其中 $\hat{C}_4$ 是绕某轴 C_4 转 $2\pi/4 = \pi/2$ 的旋转; 表 1.2 的群是四阶群 $C_{2v} = (\hat{E}, \hat{C}_2, \hat{\sigma}_v, \hat{\sigma}_v')$, 其中 $\hat{\sigma}_v$ 和 $\hat{\sigma}_v'$ 分别是对于面 σ_v 和 σ_v' 反映。这些轴和面如图 1.1 所示。这两个表是不同的, 并且是四阶群仅可能有的两种乘法表。当然, 群元的意义可以改换。例如表 1.1 中的 $\hat{C}_4$ 可换成虚数 i , 表 1.2 中的 $\hat{C}_2$ 和 $\hat{\sigma}_v$ 可分别换成空间反演 $\hat{i}$ 和时间反演 $\hat{\tau}$ 等。群元意义或符号的改换不影响乘法表, 即不改变群的结构和性质。

表 1.1 群 C_4 的乘法表

	$\hat{E}$	$\hat{C}_4$	$\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_4^3$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_4$	$\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_4^3$
$\hat{C}_4$	$\hat{C}_4$	$\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_4^3$	$\hat{E}$
$\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_4^2$	$\hat{C}_4^3$	$\hat{E}$	$\hat{C}_4$
$\hat{C}_4^3$	$\hat{C}_4^3$	$\hat{E}$	$\hat{C}_4$	$\hat{C}_4^2$

表 1.2 群 C_{2v} 的乘法表

	$\hat{E}$	$\hat{C}_2$	$\hat{\sigma}_v$	$\hat{\sigma}_v'$
$\hat{E}$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2$	$\hat{\sigma}_v$	$\hat{\sigma}_v'$
$\hat{C}_2$	$\hat{C}_2$	$\hat{E}$	$\hat{\sigma}_v'$	$\hat{\sigma}_v$
$\hat{\sigma}_v$	$\hat{\sigma}_v$	$\hat{\sigma}_v'$	$\hat{E}$	$\hat{C}_2$
$\hat{\sigma}_v'$	$\hat{\sigma}_v'$	$\hat{\sigma}_v$	$\hat{C}_2$	$\hat{E}$

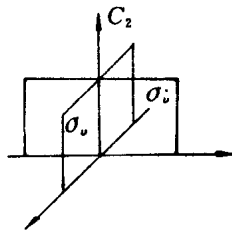


图 1.1 群 C_{2v} 的对称轴和反映面

不难看出乘法表的任何一行(或列)有如下特点:

1. 没有任何两元素相同:

$$\because g_1 \neq g_2 \quad \therefore g_i g_1 \neq g_i g_2$$

2. 不同于其它行(或列):

$$\because g_1 \neq g_2 \quad \therefore g_1 g_i \neq g_2 g_i$$

3. 重排了全部群元素:

$$\text{即} \quad g_i G = \{g_i g_1, g_i g_2, \dots, g_i g_h\} \quad (1.7)$$

重排了 G 中元素。类似地,

$$G g_i = \{g_1 g_i, g_2 g_i, \dots, g_h g_i\} \quad (1.8)$$

$$\text{和} \quad G^{-1} = \{g_1^{-1}, g_2^{-1}, \dots, g_h^{-1}\} \quad (1.9)$$

也都重排了 G 中的元素。

四、有限群的生成元

有限群中任一元素作适当幂次的自乘总可以得到恒元 E (否则群的阶不可能是有限的), 即

$$R^n = E \quad (1.10)$$

这最低整幂次 n 称为群元 R 的阶。

有限群的每个群元素都可表为尽可能少的几个群元素(生成元)及其幂的乘积。一个群的一组生成元的选择不是唯一的。但因其个数要尽可能少, 故这组生成元中的任一生成元不能再用其它生成元的乘积表示。这些生成元满足的基本关系称为“生成关系”。

例如: 群 C_4 的生成元是 $\hat{C}_4$, 满足 $\hat{C}_4^4 = \hat{E}$ 。群 C_{2v} 的生成元可选为 $\hat{C}_2$ 和 $\hat{\sigma}_v$, 满足 $\hat{C}_2^2 = \hat{\sigma}_v^2 = (\hat{C}_2 \hat{\sigma}_v)^2 = \hat{E}$, 或 $\hat{\sigma}_v'$ 和 $\hat{\sigma}_v$, 满足 $\hat{\sigma}_v'^2 = \hat{\sigma}_v^2 = (\hat{\sigma}_v' \hat{\sigma}_v)^2 = \hat{E}$ 。又如群 $C_{3v} = \{\hat{E}, \hat{C}_3, \hat{C}_3^2, \hat{\sigma}_v^{(1)}, \hat{\sigma}_v^{(2)}, \hat{\sigma}_v^{(3)}\}$ 的生成元可选为 $\hat{C}_3$ 和 $\hat{\sigma}_v^{(1)}$, 满足 $\hat{C}_3^3 = \hat{\sigma}_v^{(1)2} = (\hat{C}_3 \hat{\sigma}_v^{(1)})^2 = \hat{E}$ 等等, 这个群的对称轴和反映面的投影如图 6.5 所示。更多的例子可见第六章等。

就变换算符群 G 的应用而言, 若物理系统对于群 G 的生成元

是变换不变的,则对于群 G 的所有元素都是不变的,即群 G 是该系统的对称变换群。

第二节 群的各种子集

本节首先介绍群的子集及其乘积的一般概念,然后讨论共轭元素类,子群及其陪集等几种子集。

一、子集、复元及其乘积

1. 子集是群 G 的部分元素的集合,其中元素的排列次序无关紧要。集合中元素的个数可以小至 1 (如恒元 E),也可以大至群 G 的阶 h (这时子集就是群 G 本身)。

两子集相等 $A=B$ 意味着 $A \subset B$ 及 $B \subset A$ 。

子集 $A=\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 的逆

$$A^{-1}=\{a_1^{-1}, a_2^{-1}, \dots, a_n^{-1}\} \quad (1.11)$$

复元 (Complex) A 就是子集 A ,但强调其整体性,即作为一个元素看待。

2. 子集 $A=\{a_1, a_2, \dots, a_n\}$ 和 $B=\{b_1, b_2, \dots, b_m\}$ 的乘积

$$A \cdot B = \{\dots a_i b_j \dots\} \quad \text{其中} \begin{cases} i=1, 2, \dots, n \\ j=1, 2, \dots, m \end{cases} \quad (1.12)$$

而子集 A 和 B 的内积 ($A \cdot B$) 则是乘积 $A \cdot B$ 中不同元素的集合,即子集 $A \cdot B$ 中多次出现的元素只取一次¹⁾。

于是,前节讨论乘法表时提到的关系 (1.7) 和 (1.8) 可用复元 (或子集) 的乘积写为:

$$G=g_i, G=G g_i=(G \cdot G) \quad (\text{当 } g_i \in G) \quad (1.13)$$

上式中乘积 $g_i G$ 这种写法不会引起混淆,因将它理解为 $g_i \cdot G$ 或 $(g_i \cdot G)$ 均一样。但 $(G \cdot G)$ 则只能是内积,而许多书也写成 GG , 要注意其准确含意。

1) 许多书在论及 $A \cdot B$ 或 $(A \cdot B)$ 时均写为 AB , 注意不要混淆。

二、共轭元素和类

1. 共轭元素

设 $g_i, g_j \in G$, 则 $g_k = g_j g_i g_j^{-1}$ 与 g_i 互为共轭元素。与 g_i 共轭的元素一般不止一个, 显然它们之间也互相共轭。所有互共轭元素有某些相同的性质, 例如有相同的阶, 作为转动算符时有相同的转角、互为相似变换算符等。

2. 群的类

群 G 中互相共轭的元素的一个完全集合称为群 G 的一个类。例如 g_i 所属的类可写为

$$C_i = \{g_j g_i g_j^{-1}\} \quad (1.14)$$

其中 g_j 取遍群 G 全部元素, C_i 中多次出现的元素只取一次。若对某个 g_j 有 $g_k = g_j g_i g_j^{-1}$, 则这个类也可以 g_k 为代表, 即标为 C_k 。

有公共元素的两类必全同, 即不同的类不相交。

显然, 若 $g_l \in C_i$, 则

$$g_l C_i g_l^{-1} = C_i \quad (1.15)$$

显而易见, 任何群中恒元 E 自成一类, 阿贝尔群中各元素均自成一类。

例如, 群 C_{2v} 中的 $\hat{E}, \hat{C}_2, \hat{\sigma}_v, \hat{\sigma}_v'$ 各成一类; 群 C_4 中的 $\hat{E}, \hat{C}_4, \hat{C}_4^2, \hat{C}_4^3$ 也各成一类; 而群 C_{3v} 中有三类: $\hat{E}, 2\hat{C}_3, 3\hat{\sigma}_v$ 。更多的例子可见第六章等。

3. 类的乘积

类的乘积用子集的乘积而非内积定义, 它由完全的类组成:

$$\begin{aligned} C_a \cdot C_b &= \{a_1 a_2 \cdots a_n\} \cdot \{b_1 b_2 \cdots b_m\} \\ &= \{a_1 b_1, a_1 b_2, \cdots a_1 b_k, \cdots a_n b_m\} \end{aligned} \quad (1.16)$$

$$= \sum_{\alpha} a_{ab}^{\alpha} C_{\alpha} \quad (1.17)$$

其中 a_{ab}^{α} 是非负整数, 求和遍及群的所有类。即群 G 的类的乘积

$C_a \cdot C_b$ 由群 G 中每一类 C_α 乘以相应的出现次数 $a_{\alpha b}^x$ 拼集而成。

< 证 > 设 $a_l b_k \in C_a \cdot C_b$, $g_i \in G$

$$\begin{aligned} \text{则} \quad g_i (a_l b_k) g_i^{-1} &= (g_i a_l g_i^{-1}) (g_i b_k g_i^{-1}) \\ &= a_m b_n \in C_a \cdot C_b \end{aligned}$$

亦即, 和 $(a_l b_k)$ 同类的元素全在 $C_a \cdot C_b$ 中;

又若 $a_x b_\beta = a_l b_k$ 但 $a_x \neq a_l, b_\beta \neq b_k$ 即在 $C_a \cdot C_b$ 中元素 $(a_l b_k)$ 又以 $(a_x b_\beta)$ 形式再次出现, 则

$$\begin{aligned} g_i (a_x b_\beta) g_i^{-1} &= (g_i a_x g_i^{-1}) (g_i b_\beta g_i^{-1}) \\ &= a_\mu b_\nu \in C_a \cdot C_b \end{aligned}$$

且 $a_m b_n = a_\mu b_\nu$ 但 $a_m \neq a_\mu, b_n \neq b_\nu$

亦即 $(a_x b_\beta)$ 在 $C_a \cdot C_b$ 中出现几次, 它所属的类也出现几次。

三、子群和陪集

1. 子群

若群 G 的一个子集 H 在原乘法规则下亦构成群, 则 H 称为 G 的子群。

恒元 E 和群 G 自身是群 G 的平庸子群, 常不计。

例如, 群 C_{3v} 有如下子群:

$$\text{群 } C_3 = \{\hat{E}, \hat{C}_3, \hat{C}_3^2\} \quad \text{群 } C_v^{(1)} = \{\hat{E}, \hat{\sigma}_v^{(1)}\}$$

$$\text{群 } C_v^{(2)} = \{\hat{E}, \hat{\sigma}_v^{(2)}\} \text{ 等}$$

2. 陪集

1) 设 $g_i \neq E$ 是群 G 的元素但不是其 $(n$ 阶) 子群 H 的元素, 则

$$g_i H = \{g_i, g_i h_2, \dots, g_i h_n\} \quad (1.18)$$

称为 H 的左陪集。左陪集 $g_i H$ 也是一个 n 元素子集, 但非一个子群, 因它不含恒元 E 。

因 $(g_i h_\alpha) H = g_i H = g_i (h_\alpha H) = g_i H$, 故 $g_i H$ 也可以 g_i' 为代表, 即写为 $g_i' H$, 其中 $g_i' = g_i h_\alpha$ 是 $g_i H$ 中的任一元素。

$g_i H$ 不含 H 的任何元素, 即 $g_i H$ 和 H 完全不相交。否则, 设 $g_i h_\alpha = h_\beta$, 则 $g_i = h_\beta h_\alpha^{-1} \in H$, 和假设矛盾。