陈金全著

群表示论的新途径

上海科学技术出版社

群表示论的新途径

陈 金 全 著

上海科学技术出版社

群表示论的新途径

陈 金 全 著

上海科学技术出版社出版

（上海瑞金二路 450 号）

新华书店上海发行所发行　上海中华印刷厂印刷

开本 787×1092 1/16　印张 27.25　字数 646,000

1984 年 8 月第 1 版　1984 年 8 月第 1 次印刷

印数 1—4,200

统一书号：13119·1085　　定价：3.35 元

序

1974年起，作者和王凡、高美娟同志一起，对传统的群表示理论进行了系统的变革，试图建立一种与量子论的概念和方法相一致的群表示理论，以适应物理和化学工作者的需要．这一研究于1975年取得了初步的成功[1~8]，得出了处理群表示的一种新方法——本征函数法，解决了传统群表示理论中一些难以解决的问题．1976～78年间，完成了本征函数法的程序化问题，并首次计算了置换群 S_6 以下的内、外积约化系数，得出了系统的系数表[12]．1979年则在 SU_n 群和置换群的拉卡系数，9ν 系数，同位标量因子(Isoscalar Factor)或称为母分系数等方面获得了新的进展．

1977年12月，在全国第一次量子化学会议上介绍了新表示理论在量子化学上的应用[33]．1979年5月，中国核物理学会在苏州举办了"核集团模型和群表示报告会"，在会上较系统地介绍了"群表示的本征函数法"[34]，1979年11月至12月，安徽大学物理系在合肥举办的群表示论讲习班曾以本书的初稿为教材，进行试用．1981年1至5月作者在美国Drexel大学给研究生开群论课，亦以本书的英译稿作为讲义．1980至1981年，作者先后在美国Yale大学，Minnesota大学，Maryland大学，Los Alamos国家科学实验室，加拿大的Waterloo大学，Montreal、Dalhousie等大学进行讲学，介绍这一新表示理论．本书是在上述基础上总结而成的．高美娟同志参加了本书的部份编写工作，书中有关的具体计算几乎全是由她完成的．马光群同志参加了第十章的编写工作，并提出了很多建设性的意见．马光群同志是第一个尝试用本征函数法去处理空间群表示问题的．

在本书的写作过程中，得到了周孝谦教授的热情鼓励、支持和帮助，他仔细地审阅了原稿，吴式枢教授化了很大的精力审阅了我们在1975～1976年寄出的全部文稿．王凡、高美娟、马光群和陈选根等同志和作者进行了多次讨论，提出了很多有益的建议．1974～1975年间，冯端教授热情地支持和鼓励我们，使我们增添了前进的勇气和克服困难的信心．魏荣爵、程开甲、杨立铭、徐光宪、曲钦岳、陆埮、浦富恪、陶瑞宝、阮图南、孙洪洲、吴成礼等教授都以各种方式给予支持，鼓励和帮助．在编计算程序时得到了何旭初、王家松、姚充国、陈益梅、陈沫天等同志的帮助，作者在此一并表示衷心的感谢．

最后作者还感谢在美国和加拿大期间与M. Hamermesh, B. Bayman, F. Iachello, J. Paldus, D. H. Feng (冯达旋), J. J. Griffin, J. Ginocchio, J. Patera等教授所作的多次富有启发性的讨论，感谢他们提出的宝贵意见和对本工作的热情支持．

南京大学物理系　陈金全

1981年10月

主要记号说明

1．群

G	任一群
$\overline{G}$	内禀群
G_s	G 的一个子群
G/G_s	商群
$G(s)$	正则子群链
$G(s')$	非正则子群链
S_n, $S_f(\mathscr{S}_n, \mathscr{S}_f)$	坐标(态)空间置换群
$S_n(\omega)$	以(ω)(如$(\omega)=(1, 3, 4, 7, \cdots)$)为置换对象的置换群
U_n, $SU_n(\mathscr{U}_n, S\mathscr{U}_n)$	坐标(态)空间酉群
$E(3)$	三维欧基里德群
T	格群
$G(\boldsymbol{k})$	波矢群，小群
F	空点阵的点群
G_0	空间群 G 的点群，晶体点群
$G_0(\boldsymbol{k})$	波矢群的点群，波矢 $\boldsymbol{k}$ 的对称群
$G_k=\{\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}\}$	表象群
$G'_k=\{\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'\}$	表象群

2．群元

a, R_a, $R(a)$, R, S, T, $\cdots$,	任一群元
e, ϵ, E	么元素
p, p_i, $\begin{pmatrix} i \\ p_i \end{pmatrix}$, π,	置换算符
$\mathscr{P}$, $\mathscr{P}_i$, $\mathscr{P}_{ij}$	态置换算符
$Q_\omega=\begin{pmatrix} \omega_0 \\ \omega \end{pmatrix}$	保序置换算符
$\sigma^{n_{\varphi'}}=\sigma^{(\varphi)}$	法线方向在 $\boldsymbol{n}_{\varphi'}$ 的反射面，$\boldsymbol{n}_{\varphi'}$ 跟 x 轴的夹角为 $\varphi'=\varphi+\pi/2$
$C_2^{n_\varphi}=C_2^{(\varphi)}$	$\boldsymbol{n}_\varphi$ 方向上的二度轴，$\boldsymbol{n}_\varphi$ 和 x 轴的夹角为 φ
I	空间反演算符
$T_a=\{\epsilon\|\boldsymbol{a}\}$	平移算符
$\{\alpha\|\boldsymbol{a}\}$	空间群群元
$\{\gamma\|\boldsymbol{c}\}$	波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 群元
$\{\epsilon\|\boldsymbol{R}_n\}$	格群 T 的群元
$\mathscr{R}_i=\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}$	表象群 G_k 的群元
$R_i=\{\gamma_i\|\boldsymbol{v}(\gamma_i)\}'=e^{i\boldsymbol{k}\cdot\boldsymbol{v}(\gamma_i)}\mathscr{R}_i$,	表象群 G'_k 的群元
$\{\beta_\sigma\|\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}$	空间群 G 相对于波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 的陪集代表

3．空间及基矢

L, $\mathscr{L}$	任一表示空间

试读结束，需要全本PDF请购买 www.ertongbook.com

L_g	群 G 正则表示空间
$L_\nu = P^{(\nu)}L_g$	群 G CSCO–I 的本征空间
$L_{(\nu)k}$	群 G 第 k 个 (ν)不可约空间
$\mathscr{L}_\nu = P^{(\nu)}\mathscr{L}$	群 G CSCO–I 的本征空间
$L_k = \{u_k\}$	平移算符的本征空间
$L(\boldsymbol{k}) = \{R_l u_k\}$, 或$\{R_l\}$	表象群 G'_k 的 g_l 维(可约)表示空间
$\|\varphi_i\rangle(\|\varphi^i\rangle)$	共(逆)变基矢
$\|\bar{\varphi}_i\rangle$	dual basis
$g_{ij}(g^{ij})$	共(逆)变度规张量
$\|\omega_0\rangle = \|i_1 i_2 \cdots i_n\rangle$	正序态(态指标全不相同)
$\|\omega\rangle = \|i_1 i_2 \cdots i_n\rangle$	正序态(态指标可能相同)
$\|m_1 m_2\rangle = \psi^{(\nu_1)}_{m_1}\psi^{(\nu_2)}_{m_2}$	乘积基矢
$\boldsymbol{R}_n = n_1\boldsymbol{t}_1 + n_2\boldsymbol{t}_2 + n_3\boldsymbol{t}_3$	格矢
$\boldsymbol{K}_m = m_1\boldsymbol{b}_1 + m_2\boldsymbol{b}_2 + m_3\boldsymbol{b}_3$	倒格矢

4. 完备算符集(CSCO)

C	群 G 的 CSCO–I, 或群 G 的 CSCO
$C(s)\ (\bar{C}(s))$	正则子群链 $G(s)$(内禀子群链 $\bar{G}(s)$) 的 CSCO
$C(s')$	非正则子群链 $G(s')$ 的 CSCO
$M = (C,\ C(s))$	群 G 的 CSCO–II
$K = (C,\ C(s),\ \bar{C}(s))$	群 G 的 CSCO–III
$C(n)$	置换群 S_n 的 CSCO–I, 或 S_n 的二循环类算符
$\mathscr{C}(n)$	态置换群 $\mathscr{S}_n$ 的 CSCO–I

5. 不可约表示的标志

ν	群 G 的 CSCO–I 的本征值或群 G 不可约表示的编号
$[\nu] = [\nu_1 \nu_2 \cdots]$	配分
ν_0	伴随表示(adjoint representation)
$\bar{\nu}$	逆步(contragredient)表示
ν^*	复共轭表示
$[\tilde{\nu}]$	杨图$[\nu]$的行列转置

6. 表示矩阵

$D(R),\ D(a)$	群元 R, a 的表示
$D(C_i)$	类代数的自然表示
$D^{(\nu)}_{mk}(R)$	不可约矩阵元
$D^{(1)}(G),\ D^{(2)}(G),\ D^{(3)}(G),\ D^{(4)}(G)$	点群的四种二维不可约表示, 其基矢分别为 (1) 极矢量$(x,\ y)$　(2) 轴矢量$(R_x,\ R_y)$ (3) 轴矢量$(R_y,\ -R_x)$　(4) $(x^2-y^2,\ -2xy)$
$D^{(\nu,\boldsymbol{k})}_{ab}$	波矢群或表象群的不可约矩阵
$\mathscr{D}^{(\nu,{}^*\boldsymbol{k})}_{\tau b,\sigma a}$ 或 $\mathscr{D}^{(\nu,\boldsymbol{k})}_{\tau b,\sigma a}$	空间群的不可约矩阵

7. 不可约基矢

$\psi_m^{(\nu)}$	$G\supset G(s)$不可约基, m代表$C(s)$的本征值, 或IR的分量指标
$\psi_\varkappa^{(\mu)}$	点群不可约基
$\Psi(\beta\mu\varkappa,\ SM_s)$	多电子对称匹配(SALC)波函数
$\psi_m^{(\nu)k},\ \mathring{P}_m^{(\nu)k}$	$G\supset G(s)$ 和 $\overline{G}\supset\overline{G}(s)$ 不可约基
$\lvert Y_m^{[\nu]}\rangle$	Yamanouchi 基
$\lvert Y_{m_i}^{[\nu_i]}(\omega_i)\rangle$	$S_{n_i}(\omega_i)$ 群 Yamanouchi 基
$\left\lvert \begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rangle,\ \left\lvert\begin{pmatrix}[\nu]\\ (m)\end{pmatrix}\right\rangle$	酉群 Gelfand 基
$\lvert[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ m_1\ m_2}\rangle$	$S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 不可约基
$\lvert[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ W_1\ W_2}\rangle$	$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 不可约基
$u_k=e^{i(k+K_m)\cdot r}$	格群的不可约基
$u_{\alpha k}=\{\alpha\lvert\boldsymbol{v}(\alpha)\}u_k$	空间群一般星的不可约基
$u_{\boldsymbol{k}a}^{(\nu)}$	波矢群 $G(\boldsymbol{k})$ 或表象群 G_k 的不可约基
$u_{k\sigma a}^{(\nu)}=\{\beta_\sigma\lvert\boldsymbol{v}(\beta_\sigma)\}u_{ka}^{(\nu)}$	空间群的不可约基
$u_{\boldsymbol{k}a}^{(\nu)b}$	$G_k'\supset G(s)$ 和 $\overline{G}_k'\supset\overline{G}(s)$ 不可约基

8. 系数

$C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2}$	CG 系数, 置换群 CG 系数
$C^{(\mu)\tau\varkappa}_{\mu_1\varkappa_1,\mu_2\varkappa_2}$	点群 CG 系数
$C^{(\nu)\tau,W}_{\nu_1W_1,\nu_2W_2}$	酉群 CG 系数
$C^{(\nu'')\theta,\boldsymbol{k}''\sigma''a''}_{\nu\boldsymbol{k}\sigma a,\nu'\boldsymbol{k}'\sigma'a'}$	空间群 CG 系数
$C^{(\nu)\tau,m}_{\nu_1m_1,\nu_2m_2,\omega}$	置换群外积约化系数(ORC)
$C^{(\nu)\tau,\beta\Lambda}_{\nu_1\beta_1\Lambda_1,\nu_2\beta_2\Lambda_2}$	$G\supset G_1$ 同位标量因子(ISF)
$C^{[\nu]\beta,[\nu']\beta'}_{\sigma\sigma',\mu\mu'}$	$S_n\supset S_{n-1}$ ISF, 或 $S_n\supset S_{n-1}$ 外积 ISF
$C^{[\nu]\beta,\tau[\nu']\beta'[\nu'']\beta''}_{[\sigma]\beta\sigma'\sigma'',[\mu]\varphi\mu'\mu''}$	$S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ ISF, 或 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ 外积 ISF
$C^{[\nu]\tau,\beta[\sigma]\theta[\mu]\varphi}_{[\nu']\beta'\sigma'\mu',[\nu'']\beta''\sigma''\mu''}$	$SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ ISF, 或 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ ISF
$C^{[\nu]\tau,\beta ST}_{[\nu_1]\beta_1S_1T_1,[\nu_2]\beta_2S_2T_2}$	$SU_4\supset SU_2\times SU_2$ ISF
$C^{[\nu]\tau,\alpha L}_{[\nu_1]\alpha_1L_1,[\nu_2]\alpha_2L_2}$	$SU_{2l+1}\supset SO_3$ ISF
$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ m\end{matrix}\right\rvert[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ m_1\ m_2}\rangle$, 或 $\langle[\nu]m\lvert\tau[\nu_2]m_2\rangle$(或$\langle[\nu]m\lvert[\nu_2]\rangle$, 当$[\nu_2]=[2]$或$[11]$时),	S_n 群 Yamanouchi 基到 $S_n\supset S_{n_1}\otimes S_{n_2}$ IR 基的表象变换系数(SNSTC)
$\left\langle\begin{matrix}[\nu]\\ W\end{matrix}\right\rvert[\nu],\ {}^{\tau[\nu_1][\nu_2]}_{\ W_1\ W_2}\rangle$	SU_{m+n} 群 Gelfand 基到 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ IR 基的表象变换系数
$R^{[\nu]k}(\omega)$	归一系数

9. 其它

$\delta_p,\ \delta_a,\ \delta_\omega,\ \delta_i$	置换宇称
Λ_m^ν	Yamanouchi 基相因子

$\epsilon_i(\nu_1\nu_2\nu_\tau)$	相因子
g	有限群的阶，紧致李群的群体积
r	李群的阶(order)
l	李群的秩(rank)
$g_i(g(\varphi))$	有限群 i 类元素数(李群 φ 类元素的体积)
$N(N')$	类的数目(表象群 G'_k 中线性独立的类算符数目)
h_ν	IR(ν)的维数
$\tau,\ \theta,\ \varphi,\ \beta$	多重性指标
$C_i,\ C(\varphi)$	类算符
$\langle\nu_1\Vert T^{(\nu)}\Vert\nu_2\rangle^{(\tau)}$	不可约矩阵元(根据 Rose 定义)
$P^{(\nu)}$	投影算符
$P_m^{(\nu)k}$	广义投影算符
C_{ij}^k	有限群结构常数
$C_{\rho\sigma}^\tau$	李代数结构常数
$(\nu_1\nu_2\nu)$	乘积表示$(\nu_1)\times(\nu_2)$ 中 IR(ν)出现的次数
$\{\nu_1\nu_2\nu\}$	置换群外积$[\nu_1]\otimes[\nu_2]$ 中，IR$[\nu]$出现的次数
$\chi_i^{(\nu)}(\chi^{(\nu)}(\varphi))$	i 类(φ 类)特征标
$\chi(R_a)$	群元 R_a 的特征标

内容简介

本书系统地介绍了一种新的群表示理论．其特点是用量子力学中狄拉克的完备算符集理论作为群表示论的基础．理论本身简明易懂，方法简单，使用方便．较之传统的群表示论有很多优点．书中也讨论了新、老群表示论之间的联系，所用的记号和位相约定都尽可能和传统的一致．因此掌握了这一理论也可毫无困难地阅读用传统表示论处理问题的参考书和文献．

本书是针对有线性代数和初等量子力学基础的读者写的，因此起点较低．但本书所要达到的目标却比较高，内容较丰富，对置换群、酉群、点群和空间群的特征标、不可约基和不可约矩阵元、CG 系数、母分系数或同位标量因子都作了详细讨论，并附了一些常用的系数表．对群论在多粒子体系中的应用也作了阐述．

本书可作为物理或量子化学专业的大学生或研究生的教材，也可供基本粒子、原子核、原子、分子、固体物理工作者以及大专院校有关专业师生参考．

本书所阐述的求群表示的本征函数方法于 1982 年获全国自然科学四等奖。

目　　录

试读结束，需要全本PDF请购买 www.ertongbook.com

引　言

群论和量子论

群表示理论在量子物理学中起着很重要的作用，是物理学(包括原子、分子、固体、原子核和基本粒子各个领域)和量子化学等学科中一种很重要的数学工具. 有关群论的著作多得不胜枚举，但是所有这些著作都是属于同一种类型的，总包含着一大堆数学家所用的术语，一大堆定义、引理、定理等. 因此一些初学者学过一些群论著作后，往往抓不住要领，而是象 Lipkin(1965)所说，得到的只是一个模糊的印象. 因此有些人竟把群论看成一种高级奢侈品(high luxuary). Соколов(1956)在一篇文章中写道："由于群论，尤其是置换群的表示和特征标理论，甚至对于专家来说也是极其困难的，因而历史上曾出现过反对量子力学中的所谓'群瘟'(group pest)的倾向". Salam(1963)也曾经说过："1951 年我有幸听了拉卡(Racah)教授在普林斯顿作的李群讲演，听完讲演之后，我想这真是太难了，我不可能学会它…." Salam 还指出了传统群表示理论的症结所在，即它是非物理的. 群论这个数学分支是早在量子力学出现之前就由数学家独立创造的，不象微积分那样是由物理学家和数学家共同创造的，因此群论对物理学家来说是一种"舶来品"，学起来困难，用起来不顺手. 其次传统群论对各种群的表示也没有一个统一的处理方法，解决具体群的表示问题还需特殊的技巧. 点群是点群的一套，空间群是空间群的一套，置换群又完全是另一套. 李群和有限群之间更是隔着一道鸿沟. 这些都严重地阻碍了群论在物理和化学工作中的广泛应用.

能不能使群论让物理和化学工作者掌握起来容易一些呢？我们感到群论和量子论之间有着深刻的内在联系. 量子力学中处理的是力学量和量子态，它们的数学表示是线性算符和态矢量；群表示论讨论的则是群元算符的表示和荷载该表示的基矢量，两者十分相似，只是由于历史的原因才造成了今天这种互相脱节的局面. 如果我们按量子力学精神对群表示论进行适当改造，应该可以使群论和量子论之间的关系犹如微积分和经典物理那样融洽. 不少人都表示过类似的愿望(如 Gamba, Killingbeck 等)，在李群表示论方面，经过 Racah, Biedenharn 等人的努力，取得了较大的进展，而有限群表示论方面则还是传统的一套. 我们在 Racah 理论的启发下，把量子力学中的完备算符集 (Complete set of commuting operators, 记为 CSCO)概念引进群表示论，给出了一种完全按量子力学方法处理问题的群表示论. 其特点是：概念简单；与量子力学关系密切，因此便于理解和应用. 如果我们把群表示论中用的语言改用量子力学表象理论语言，则群表示论和量子力学表象理论之间的关系就清楚地显现出来了. 我们可以作以下对照：

群表示论术语	量子力学表象理论术语
1. 基矢 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 张开一个空间 L，荷载群 G 的一个表示 D.	1. 态 $\psi_1, \psi_2, \cdots, \psi_n$ 构成一个表象 $\{\psi_i\}$ 的基.
2. 群 G 的元素 R 和类算符 C_i 在	2. 算符 R 和 C_i 在表象 $\{\psi_i\}$ 中的矩

L 中的矩阵表示分别为[1)]

$$D_{ab}(R) \text{ 和 } D_{ab}(C_i).$$

3．群 G 在空间 L 中的 CSCO.

4．群 G 的可约表示（不可约表示）.

5．CSCO 的本征值标志不可约基.

6．群 G 的可约表示到不可约表示的约化.

阵表示分别为[1)]

$$\langle\psi_a|R|\psi_b\rangle = D_{ab}(R),$$
$$\langle\psi_a|C_i|\psi_b\rangle = D_{ab}(C_i).$$

3．同左.

4．CSCO 的非对角表象（对角表象）.

5．CSCO 的本征值（量子数）标志量子态.

6．CSCO 的非对角表象到对角表象的表象变换.

按照这一新的理论，我们就把群表示论的基本问题——如求特征标、不可约基、不可约矩阵元、CG 系数(Clebsch-Gordan)系数、母分系数 (Fractional Parentage Coefficients)等等统统都归结为求相应空间的 CSCO 的本征值和本征函数问题，因此这套办法可称为本征函数法．

本征函数法的优点是易于程序化，我们用此法编制了计算置换群 CG 系数和外积约化系数的程序，首次计算了六个粒子以内的系数表(见《置换群约化系数及其应用》，1981，科学出版社出版)．解决了置换群传统表示论中的一个老大难问题．此外还解决了一些物理、化学应用中迫切需要解决的置换群和高秩酉群表示论问题，如

1．置换群非标准基到标准基之间的表象变换系数.

2．构造任意 n 的 SU_n 群的 Gelfand 基.

3．Gelfand 表象下任意 n 的 SU_n 群 CG 系数.

4．n 为任意值的 SU_n 群拉卡系数和 9ν 系数.

5．构造 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 分类基和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基的普适方法.

6．计算 m, n 为任意数时的 $SU_{mn}\supset SU_m\times SU_n$ 和 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 母分系数.

7．计算 $SU_{m+n}\supset SU_m\otimes SU_n$ 分类基到 SU_{m+n} Gelfand 基的表象变换矩阵.

本书是针对具有以下基础知识的读者写的：

1．线性代数(如不变子空间，最小不变子空间，矩阵对角化，解线性齐次方程组，张量代数等等)．

2．量子力学表象理论(CSCO 概念，对角表象和非对角表象，表象变换等)．某些章节还需用到角动量理论基础．

3．初步的群论基础

第 3 点并不是必需的．本书所用到的群论和群表示论基础在第一、二章都作了交待．为了节省篇幅，部分定理没有证明，而仅用例子作些说明．这两章对学过一点群表示论的读者起复习和统一记号的作用，对新读者则起引路作用，使他们读本书时可以不必翻阅其它书籍．如果读者感到过于简略，或者对略去的证明特别感兴趣，则可参阅 Hamermesh 的书．

由于群表示论的内容十分丰富，本书只能集中在与本征函数法有关的问题上，至于一些其它书上都能找到的内容则尽量少写．

1) 对非正交归一基，两者的定义是不一致的，见 §2.11.

群表示论 一 乙

试读结束，需要全本PDF请购买 www.ertongbook.com