

对称性原理

(二)

有限对称群的表象及其群论原理

唐 有 祺

科学出版社

目 录

第一章 矩阵代数基础

§ 1. 矩阵的定义和运算规则	2
1-1. 矩阵和换位矩阵	2
1-2. 矩阵的加法	3
1-3. 矩阵的乘法	3
1-4. 方阵和向量	4
练习和应用	5
§ 2. 方阵的定义和定理	7
2-1. 方阵的迹和两个定理	7
2-2. 方阵的行列式和两个公式	9
2-3. 分隔方阵和方块方阵	10
2-4. 方阵的直积和有关的定理	13
2-5. 方阵的重要型式	14
2-6. 方阵的相似换算、特征值和对角化	17
练习和应用	20

第二章 对称换算和方阵表象

§ 3. 对称操作和坐标对称换算	30
3-1. 点群 C_{2v} 的坐标对称换算方阵	32
3-2. 旋转操作的坐标换算方阵	33
3-3. 点群 C_{3v} 的方阵表象	37
练习和应用	40
§ 4. 多维向量空间和对称换算	46
4-1. 多维向量空间	47
4-2. 对称换算的重要性质	49
4-3. 不变亚空间和不可约表象	51
练习和应用	54
§ 5. 分子的简正振动方式	55
5-1. 分子的简化坐标和能量函数	55

5-2. 简正坐标和主轴换算	57
5-3. 简正坐标的对称换算	60
5-4. 分子 X_3 的简正运动方式	62
练习和应用	77
§ 6. 函数空间和对称换算	84
6-1. 函数空间	84
6-2. 对称换算算符	86
6-3. 函数空间中的对称换算	87
6-4. 函数空间和表象的通约	93
练习和应用	94
§ 7. 原子的杂化轨函数	98
7-1. 杂化轨函数的对称换算	100
7-2. 原子轨函数的对称换算	100
7-3. 不变亚空间概念的应用	102
7-4. 正四面体向的杂化轨函数	103
练习和应用	110

第三章 有限点群的不可约表象

§ 8. 不可约表象的正交组元系定理	117
8-1. 正交组元系定理的公式	119
8-2. 正交特征标系定理	121
8-3. 可约表象的分解公式	123
8-4. 投影算符	126
8-5. 两个预备定理	129
8-6. 正交组元系定理的证明	133
练习和应用	137
§ 9. 有限点群的特征标表	150
9-1. 同构群表象定理	153
9-2. 轮回群	155
9-3. 非轮回的互换群	159
9-4. 非互换的中级点群	160
9-5. 高级点群	166

9-6. 不可约表象的典型基础	169
练习和应用	171
§ 10. 分子的电子结构问题	173
10-1. 波函数的不可约表象定理	173
10-2. 苯分子的电子结构	175
10-3. 八面体分子 MX_6 的电子结构	182
练习和应用	190
§ 11. 电子构型和谱项	206
11-1. 谱项及其与组态的关系	206
11-2. 谱项的推引	213
11-3. 谱项和能级图	216
11-4. 波函数表象的微扰定理	219
11-5. 谱项与关联表	222
11-6. 递降对称性法	225
练习和应用	229
§ 12. 分子光谱选律	238
12-1. 量子力学方阵	238
12-2. 光谱跃迁几率公式	240
12-3. 光谱选律及其群论原理	247
12-4. 振动光谱的选律	248
12-5. 电子光谱选律	255
练习和应用	263
附录一 点对称群的特征标表	267
附录二 直积公式	278
附录三 $(\gamma)^n$ 的谱项	280
参考书目	281
主要符号表	282

第一章 矩阵代数基础

对称图象都是由若干个相等的部分或单元按照一定方式组成的，而这个方式经过抽象和概括，成为对称图象所属的对称操作群，简称对称群。

对称操作既可以使对称图象复原，又可以联系其中的各个相等的部分或单元。

现在我们考虑对称群 G 中有 N 个操作，即

$$G = \{R_1 (=E), R_2, \dots, R_N\}$$

则从空间的一个点 P_1 出发，通过这样的 N 个操作，可以在这个空间中引出 N 个成套的相当点：

$$P_1, P_2, \dots, P_N$$

而这 N 个相当点的坐标或向量 $p_1, p_2, \dots, p_N$ 之间，可以通过与 N 个对称操作‘等效’的 N 个方阵进行换算。这样的换算称为对称换算，而相应的方阵称为对称换算方阵。

对称群 G 中的 N 个操作给出的 N 个对称换算方阵，形成 G 的一个表象，而通过这个表象中的方阵进行换算的东西，称为表象的基础。表象的基础就是所谓向量。

对称群 G 的表象是由 N 个方阵组成的，而且一定是一个与 G 同构或同态的群。

实际上，意义较大的表象，其基础所涉及的空间往往是一个广义的向量空间。

本章的中心内容是矩阵代数基础。

我们要在 § 1 中介绍矩阵的定义和运算规则，然后在 § 2 中进一步介绍有关方阵的定义和定理。

不掌握矩阵代数中的这点基础，根本谈不到掌握对称群的表象。

§ 1. 矩阵的定义和运算规则

先交代矩阵的定义和运算规则。

1-1. 矩阵和换位矩阵

一般需要由两个代表序数的指标规定的一组数，形成一个矩阵。

例如 $m \times n$ 元的矩阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdot & a_{mn} \end{bmatrix}$$

系由 $m \times n$ 个数所组成，它们各分成 m 个行和 n 个列，其中某一组元 a_{ij} 取决于代表它所在的行和列的序数的指标 i 和 j 。根据这样的矩阵，我们只要给出指标 i 和 j ，就可给出组元 a_{ij} 。

与矩阵 A 相等的矩阵 B 必须也是一个 $m \times n$ 元的矩阵，而且其中的任一组元 $b_{ij} = a_{ij}$ 。

在上面的 $m \times n$ 元矩阵 A 中，我们可以把 m 个行顺序写成 m 个列，或把 n 个列顺序写成 n 个行，而这样得出的 $n \times m$ 元矩阵称为矩阵 A 的换位矩阵 $\tilde{A}$ ，即

$$\tilde{A} = \text{Tr} \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdot & a_{mn} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{21} & \cdot & a_{m1} \\ a_{12} & a_{22} & \cdot & a_{m2} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{1n} & a_{2n} & \cdot & a_{mn} \end{bmatrix}$$

式中 $\tilde{A}$ 代表 A 的换位矩阵，而记号 Tr 也代表换位。换位矩阵 $\tilde{A}$ 再换位后仍得原来的矩阵 A ，即 $A = \text{Tr} \tilde{A}$ 。

1-2. 矩阵的加法

两个都是 $m \times n$ 元的矩阵 A 和 B 可以相加, 并给出一个 $m \times n$ 元的矩阵 C :

$$\begin{aligned} A+B &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdot & a_{mn} \end{bmatrix} + \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdot & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdot & b_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{m1} & b_{m2} & \cdot & b_{mn} \end{bmatrix} \\ &= \begin{bmatrix} a_{11}+b_{11} & a_{12}+b_{12} & \cdot & a_{1n}+b_{1n} \\ a_{21}+b_{21} & a_{22}+b_{22} & \cdot & a_{2n}+b_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1}+b_{m1} & a_{m2}+b_{m2} & \cdot & a_{mn}+b_{mn} \end{bmatrix} \\ &= C \end{aligned}$$

加法规则可以归纳为:

$$c_{ij} = a_{ij} + b_{ij}$$

在加法规则的基础上, 我们可以进一步给出:

$$\lambda A = \begin{bmatrix} \lambda a_{11} & \lambda a_{12} & \cdot & \lambda a_{1n} \\ \lambda a_{21} & \lambda a_{22} & \cdot & \lambda a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ \lambda a_{m1} & \lambda a_{m2} & \cdot & \lambda a_{mn} \end{bmatrix}$$

$$(\lambda + \mu)A = \lambda A + \mu A$$

$$\lambda(A+B) = \lambda A + \lambda B$$

$$A-A = \begin{bmatrix} 0 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 0 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & 0 \end{bmatrix} = O_{(m \times n)}$$

1-3. 矩阵的乘法

矩阵的运算中最重要的是矩阵的乘法。

一个 $m \times n$ 元的矩阵 A 可以左乘一个 $n \times p$ 元的矩阵 B , 并给出一个 $m \times p$ 元的矩阵 C :

$$AB = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdot & a_{1n} \\ a_{21} & a_{22} & \cdot & a_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdot & a_{mn} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdot & b_{1p} \\ b_{21} & b_{22} & \cdot & b_{2p} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdot & b_{np} \end{bmatrix}$$

$$= \begin{bmatrix} c_{11} & c_{12} & \cdot & c_{1p} \\ c_{21} & c_{22} & \cdot & c_{2p} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ c_{m1} & c_{m2} & \cdot & c_{mp} \end{bmatrix} = C$$

矩阵的乘法规则可以表达如下:

$$c_{ij} = a_{i1}b_{1j} + a_{i2}b_{2j} + \cdots + a_{in}b_{nj} = \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$$

根据乘法规则, 矩阵的乘法当遵循下列规律:

$$A(BC) = (AB)C$$

$$A(B+C) = AB + AC$$

$$(\lambda A)B = \lambda(AB)$$

在乘法中, 两个矩阵一般并不能互换。这是矩阵乘法的一个特色。

我们不难论证, 乘积矩阵 $C = AB$ 的换位矩阵为:

$$\tilde{C} = \tilde{B}\tilde{A}$$

1-4. 方阵和向量

在矩阵中, 我们以后经常遇到的是行数与列数相等的方阵。此外, 我们也经常遇到 $m \times 1$ 元的列矩阵或 m 维的列向量:

$$\mathbf{x} = \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \cdot \\ x_m \end{bmatrix}$$

它的换位矩阵

$$\tilde{x} = \text{Tr} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} = [x_1 x_2 \cdots x_m]$$

是一个 $1 \times m$ 元的行矩阵或 m 维的行向量。只需要一个代表序数的指标规定的一组数, 形成一个向量。

练习和应用

1.1 请给出下列换位矩阵:

$$(1) \quad \text{Tr} \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(2) \quad \text{Tr} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$(3) \quad \text{Tr} \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(4) \quad \text{Tr}[xyz]$$

1.2 请练习矩阵的加法:

$$(1) \quad \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix} \pm \begin{bmatrix} u & v & w \\ x & y & z \end{bmatrix}$$

$$(2) \quad 7 \begin{bmatrix} a & b & c \\ d & e & f \end{bmatrix}$$

1.3 请阐述, 矩阵的乘法规则可以“形象地”表达如下:

$$c_{ij} = [a_{i1} a_{i2} \cdots a_{in}] \begin{bmatrix} b_{1j} \\ b_{2j} \\ \vdots \\ b_{nj} \end{bmatrix}$$

$$= \sum_{k=1}^n a_{ik} b_{kj}$$

1.4 请练习矩阵的乘法:

$$(1) \begin{bmatrix} 1 & 2 \\ 1 & 3 \\ 2 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 2 & 3 & 1 & 1 \\ 2 & 1 & 2 & 4 \end{bmatrix}$$

$$(2) \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\sqrt{\frac{2}{3}} \\ 0 & \sqrt{\frac{2}{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(3) \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$(4) \begin{bmatrix} \cos\theta & \sin\theta & 0 \\ -\sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & -\sin\theta & 0 \\ \sin\theta & \cos\theta & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

$$(5) [xyz] \begin{bmatrix} a & h & g \\ h & b & f \\ g & f & c \end{bmatrix} \begin{bmatrix} x \\ y \\ z \end{bmatrix}$$

$$(6) \begin{bmatrix} \cos\psi & \sin\psi & 0 \\ -\sin\psi & \cos\psi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\theta & 0 & -\sin\theta \\ 0 & 1 & 0 \\ \sin\theta & 0 & \cos\theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \cos\varphi & \sin\varphi & 0 \\ -\sin\varphi & \cos\varphi & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{bmatrix}$$

1.5 下面六个二维方阵按照矩阵的乘法形成一个六阶群:

$$E^{(2)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \quad A = \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{bmatrix}$$

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

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

请为这个群立出乘法表。

1.6 请根据公式 $\text{Tr}(AB) = \widetilde{B}\widetilde{A}$ 论证:

$$\text{Tr}(ABCD) = \widetilde{D}\widetilde{C}\widetilde{B}\widetilde{A}$$

提示: $\text{Tr}[(ABC)D] = \widetilde{D}\text{Tr}(ABC) = \dots$

1.7 请得出下列乘积:

$$(1) \begin{matrix} [x_1 x_2 \cdots x_m] \\ (1 \times m) \end{matrix} \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \begin{matrix} \\ (m \times 1) \end{matrix}$$

$$(2) \begin{bmatrix} x_1 \\ x_2 \\ \vdots \\ x_m \end{bmatrix} \begin{matrix} [x_1 x_2 \cdots x_m] \\ (1 \times m) \end{matrix} \begin{matrix} \\ (m \times 1) \end{matrix}$$

§ 2. 方阵的定义和定理

群的表象系由方阵组成。现在要对方阵的定义和定理有所介绍。

2-1. 方阵的迹和两个定理

在方阵中,全部对角元的和,称为方阵的迹。对角元系指方阵对角线上的各个组元。

例如 $m \times m$ 元或 m 维的方阵

$$A = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \vdots & \vdots & \ddots & \vdots \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} \end{bmatrix}$$

的迹为

$$\chi_A = a_{11} + a_{22} + \cdots + a_{mm} = \sum_{i=1}^m a_{ii}$$

方阵的对角元在换位中不变。因此, 方阵 A 与它的换位方阵 $\tilde{A}$ 的迹一定相等, 即

$$\chi_A = \chi_{\tilde{A}}$$

这个定理称为方阵换位迹不变定理。

我们还要进一步指出, 同维方阵 A 和 B 的两个乘积方阵 $C=AB$ 和 $D=BA$ 具有相同的迹, 即

$$\chi_C = \chi_{AB} = \chi_{BA} = \chi_D$$

根据乘法规则, 不难给出

$$\chi_C = \sum_{j=1}^m c_{jj} = \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m a_{jk} b_{kj}$$

$$\chi_D = \sum_{k=1}^m d_{kk} = \sum_{k=1}^m \sum_{j=1}^m b_{kj} a_{jk}$$

$$= \sum_{j=1}^m \sum_{k=1}^m a_{jk} b_{kj} = \chi_C$$

这个方阵乘积的迹不变定理说明, 方阵 A 和 B 在乘法中一般并不互换, 但乘法的次序却并不影响乘积方阵的迹, 即

$$AB \neq BA$$

但

$$\chi_{AB} = \chi_{BA}$$

在这个定理的基础上, 我们不难进一步得出

$$\chi_{B^{-1}AB} = \chi_A$$

式中方阵 B^{-1} 为方阵 B 的倒易方阵, 即

$$B^{-1}B = BB^{-1} = E^{(m)}$$

在称为 m 维主方阵的 $E^{(m)}$ 中, 对角元全为 1, 而非对角元全为 0。

2-2. 方阵的行列式和两个公式

方阵

$$A^{(m)} = \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} \end{bmatrix}$$

的行列式为

$$\begin{aligned} \det A^{(m)} &= \begin{vmatrix} a_{11} & a_{12} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{22} & \cdots & a_{2m} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{m1} & a_{m2} & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix} = \sum_{j=1}^m a_{ij} A_{ij} \\ &= \sum_{i=1}^m a_{ij} A_{ij} \end{aligned}$$

式中 A_{ij} 称为组元 a_{ij} 的余子式。在这个 m 维行列式中，划去第 i 行和第 j 列后可以得出一个 $(m-1)$ 维的行列式，然后按 $(-1)^{i+j}$ 加上正或负号，即可得出余子式 A_{ij} 。而一维方阵 $A^{(1)} = [a]$ 的行列式 $\det A^{(1)} \equiv a$ 。

例如在上面的行列式 $\det A^{(m)}$ 中，要得出余子式 A_{12} ，可以先划去第 1 行和第 2 列，然后按 $(-1)^{1+2} = -1$ 为得出的 $(m-1)$ 维行列式加上负号，即余子式 A_{12} 为

$$A_{12} = (-1)^{1+2} \begin{vmatrix} a_{11} & a_{13} & \cdots & a_{1m} \\ a_{21} & a_{23} & \cdots & a_{2m} \\ a_{31} & a_{33} & \cdots & a_{3m} \\ \cdot & \cdot & & \cdot \\ a_{m1} & a_{m3} & \cdots & a_{mm} \end{vmatrix}$$

在行列式 $\det \mathbf{A}^{(m)}$ 中, 我们还可以进一步指出:

$$\begin{aligned} \sum_{j=1}^m a_{ij} A_{ij} &= [a_{i1} \ a_{i2} \ \cdots \ a_{im}] \begin{bmatrix} A_{i'1} \\ A_{i'2} \\ \vdots \\ A_{i'm} \end{bmatrix} \\ &= \delta_{ii'} |\det \mathbf{A}^{(m)}| \\ \sum_{i=1}^m a_{ij} A_{ij} &= [a_{1j} \ a_{2j} \ \cdots \ a_{mj}] \begin{bmatrix} A_{1j'} \\ A_{2j'} \\ \vdots \\ A_{mj'} \end{bmatrix} \\ &= \delta_{jj'} |\det \mathbf{A}^{(m)}| \end{aligned}$$

根据行列式的定义, 我们最后可以给出下列两个重要公式:

$$\begin{aligned} \det \mathbf{A} &= \det \tilde{\mathbf{A}} \\ \det(\mathbf{AB}) &= \det \mathbf{A} \det \mathbf{B} \end{aligned}$$

不难从后者进一步得出

$$\det(\mathbf{B}^{-1}\mathbf{AB}) = \det \mathbf{A}$$

2-3. 分隔方阵和方块方阵

一个方阵可以分隔为较小的亚矩阵, 并通过它们表达成一个元数较低的分隔方阵。

例如下面两个三维的方阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 都可按相似的方式分为四个较小的亚矩阵, 并可通过它们表达成一个二维的分隔方阵:

$$\begin{aligned} \mathbf{A} &= \left[\begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & a_{13} \\ a_{21} & a_{22} & a_{23} \\ \hline a_{31} & a_{32} & a_{33} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} \mathbf{A}_{11} & \mathbf{A}_{12} \\ \hline \mathbf{A}_{21} & \mathbf{A}_{22} \end{array} \right] \\ \mathbf{A}_{11} &= \begin{bmatrix} a_{11} & a_{12} \\ a_{21} & a_{22} \end{bmatrix}, \quad \mathbf{A}_{12} = \begin{bmatrix} a_{13} \\ a_{23} \end{bmatrix} \\ \mathbf{A}_{21} &= [a_{31} \ a_{32}], \quad \mathbf{A}_{22} = [a_{33}] \end{aligned}$$

$$B = \left[\begin{array}{cc|c} b_{11} & b_{12} & b_{13} \\ b_{21} & b_{22} & b_{23} \\ \hline b_{31} & b_{32} & b_{33} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} B_{11} & B_{12} \\ \hline B_{21} & B_{22} \end{array} \right]$$

$$B_{11} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} \\ b_{21} & b_{22} \end{bmatrix}, \quad B_{12} = \begin{bmatrix} b_{13} \\ b_{23} \end{bmatrix}$$

$$B_{21} = [b_{31} \ b_{32}], \quad B_{22} = [b_{33}]$$

经过这样分隔以后, 方阵 A 和 B 的乘积当可给出如下:

$$AB = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} + A_{12}B_{21} & A_{11}B_{12} + A_{12}B_{22} \\ A_{21}B_{11} + A_{22}B_{21} & A_{21}B_{12} + A_{22}B_{22} \end{bmatrix}$$

我们以后经常遇到的分隔方阵将是一组相似的方块方阵。这是一组同维的方阵, 它们的非零组元都相似地集中在对角线附近, 并形成一系列为对角线所贯穿的亚方阵。

例如下面的三维方阵 A 和 B 是两个相似的方块方阵:

$$A = \left[\begin{array}{cc|c} a_{11} & a_{12} & 0 \\ a_{21} & a_{22} & 0 \\ \hline 0 & 0 & a_{33} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} A_{11} & O^{(2 \times 1)} \\ \hline O^{(1 \times 2)} & A_{22} \end{array} \right]$$

$$B = \left[\begin{array}{cc|c} b_{11} & b_{12} & 0 \\ b_{21} & b_{22} & 0 \\ \hline 0 & 0 & b_{33} \end{array} \right] = \left[\begin{array}{c|c} B_{11} & O^{(2 \times 1)} \\ \hline O^{(1 \times 2)} & B_{22} \end{array} \right]$$

这两个相似的方块方阵的乘积当为

$$AB = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & O^{(2 \times 1)} \\ O^{(1 \times 2)} & A_{22}B_{22} \end{bmatrix} = C$$

乘积方阵 $C=AB$ 亦为一个与 A 和 B 相似的方块方阵。

现在设想两个较大的相似方块方阵:

$$A = \begin{bmatrix} A_{11} & & & \\ & A_{22} & & \\ & & A_{33} & \\ & & & A_{44} \end{bmatrix}$$

$$B = \begin{bmatrix} B_{11} & & & \\ & B_{22} & & \\ & & B_{33} & \\ & & & B_{44} \end{bmatrix}$$

它们的乘积当亦为一个相似的方块方阵：

$$C = AB = \begin{bmatrix} A_{11}B_{11} & & & \\ & A_{22}B_{22} & & \\ & & A_{33}B_{33} & \\ & & & A_{44}B_{44} \end{bmatrix}$$

在一组这样的方块方阵中，各个亚方阵自成一系，从而具有独立性。

上面的方块方阵 A 可以写成组成它的亚方阵 $A_{11}, A_{22}, A_{33}, A_{44}$ 的直和，即

$$A = A_{11} \dot{+} A_{22} \dot{+} A_{33} \dot{+} A_{44}$$

采用 $\dot{+}$ 为直和的符号，以示有别于一般的加号。与方块方阵 A 相似的方阵 B 可以写成

$$B = B_{11} \dot{+} B_{22} \dot{+} B_{33} \dot{+} B_{44}$$

相似的方块方阵 A 和 B 的乘积可以写成

$$C = AB = A_{11}B_{11} \dot{+} A_{22}B_{22} \dot{+} A_{33}B_{33} \dot{+} A_{44}B_{44}$$

在方块方阵 A 中，有时亚方阵 $A_{11}, A_{22}, \dots$ 都是一维方阵。

这样的方块方阵称为对角方阵。

例如下面给出的是一个 $m \times m$ 元或 m 维的对角方阵：

$$\mathbf{A} = \begin{bmatrix} a_{11} & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & a_{22} & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & a_{mm} \end{bmatrix}$$

下面的 m 维对角方阵就是所谓 m 维主方阵：

$$\mathbf{E}^{(m)} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & \cdot & 0 \\ 0 & 1 & \cdot & 0 \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ 0 & 0 & \cdot & 1 \end{bmatrix}$$

2-4. 方阵的直积和有关的定理

两个方阵可以按照两种乘法得出两种乘积。

两个 m 维的方阵可以根据 1-3 中的乘法得出一个 m 维的方阵。这种乘法称为内乘法，所得乘积称为内积。

一个 m 维的方阵 $\mathbf{A}$ 与一个 n 维的方阵 $\mathbf{B}$ 也可以通过外乘法得出一个 $m \times n$ 维的方阵。这样的乘积称为直积。方阵 $\mathbf{A}$ 和 $\mathbf{B}$ 的直积 $\mathbf{A} \times \mathbf{B}$ 定义如下：

$$\mathbf{A} \times \mathbf{B} = \begin{bmatrix} a_{11}\mathbf{B} & a_{12}\mathbf{B} & \cdot & a_{1m}\mathbf{B} \\ a_{21}\mathbf{B} & a_{22}\mathbf{B} & \cdot & a_{2m}\mathbf{B} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ a_{m1}\mathbf{B} & a_{m2}\mathbf{B} & \cdot & a_{mm}\mathbf{B} \end{bmatrix}$$

式中

$$\mathbf{B} = \begin{bmatrix} b_{11} & b_{12} & \cdot & b_{1n} \\ b_{21} & b_{22} & \cdot & b_{2n} \\ \cdot & \cdot & \cdot & \cdot \\ b_{n1} & b_{n2} & \cdot & b_{nn} \end{bmatrix}$$

下面将二维的方阵 $\mathbf{A}$ 与二维的方阵 $\mathbf{B}$ 的直积展开如下：