

物理·化学专业用

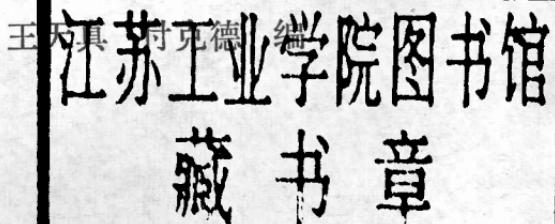
群 论

王天真 付克德 编

陕西师范大学出版社

群 论

(物理化学专业用)



陕西师范大学出版社

群 论

王天真 付克德 编

陕西师范大学出版社出版

(西安市陕西师大120信箱)

陕西省新华书店经销

西安小寨印刷厂印刷

开本787×1092 1/32 印张13.25 插页2 字数279千字

1987年12月第1版 1987年12月第1次印刷

印数：1—1 000册

ISBN7-5613-0041-7/G·67

统一书号：7403·67 定价：2.23元

前　　言

本书是编者在给研究生和本科生讲课的讲义基础上，吸收了专家和同学们的意见编写而成的。它可作为物理系、化学系有关专业研究生教材，本科生的选修课教材，也可供有关科研工作者、高校师生参考。

随着科学技术的发展，近年来群论被大量地应用于物理、化学等学科。因此，广大物理和化学工作者，愈来愈感到掌握群论的重要性。本书正是适应这种需要，本着应用群论的目的而编写的。

在编写过程中，我们充分注意到以下几点：

一、可接受性。群论较为抽象，我们力求深入浅出，在引入一些概念时，尽可能地结合物理内容，列举较多实例，进而加以概括升华；对基础部分的定理力求作到详尽推导；对其余部分，则不过分强调数学的严密性，而着重从物理模型去阐明问题。

二、加强基础。考虑到各专业的共同需要，本书加强了基础。如对同态与同构映射，有限群的基础理论，循环群，置换群，李群的生成元，李代数等部分，都作了较详尽的讨论。

三、重视应用。为了学以致用，本书突出了群的表示理论和特征标理论，较为细致地介绍了物理、化学中常用到的置换群、晶体点群和分子点群、 $SO(3)$ 群和 $SU(2)$ 群等典型

群。此外还增加了“有限群在物理学中的应用”和“量子力学中的群论”两章，其中前一章和后一章的部分内容，选自编者近年来发表的一些论文。在这些章节中，对群论应用于物理、化学中的根据、条件和范围，以及如何把物理问题转化为群论问题等方面，做了详细的讨论，通过这些群论应用的范例，使读者学习之后，可以起到举一反三的作用。

四、本书在每章(除第六章)之后，都配备有一定数量的习题，使读者通过解题，巩固基础，掌握运算技巧，从而培养利用群论解决实际问题的能力。

限于编者水平，书中错误在所难免，欢迎批评指正。

编 者

1987年12月于陕西师范大学

目 录

第一章 集合论概述	(1)
§1 集合的概念和集合的运算.....	(1)
§2 映射.....	(8)
§3 同态、同构.....	(11)
§4 关系、等价关系、商集.....	(15)
§5 次序关系.....	(20)
习 题.....	(21)
第二章 群论基础	(23)
§1 群的定义和群表定理.....	(23)
§2 循环群.....	(31)
§3 子群和陪集.....	(33)
§4 给定阶的不同构的群——拉格朗日定理的应用.....	(37)
§5 类、正规子群、商群.....	(41)
§6 直积群与群的直积分解.....	(46)
§7 群的同态映射.....	(48)
§8 置换群.....	(52)
习 题.....	(63)
第三章 有限群的表示理论	(66)
§1 群表示的定义.....	(66)
§2 向量空间与希耳伯特空间.....	(72)
§3 向量空间的算符，算符的矩阵表示.....	(81)

§4 表示空间.....	(87)
§5 可约表示与不可约表示.....	(96)
§6 舒尔引理.....	(102)
§7 不可约表示的正交性定理.....	(107)
§8 群元空间、矩阵元正交定理的解释.....	(113)
习 题.....	(117)
第四章 表示的特征标.....	(120)
§1 表示的特征标及不可约表示特征标的 正交性定理.....	(120)
§2 类空间.....	(122)
§3 群表示约化问题的特征标判据.....	(125)
§4 正规表示.....	(129)
§5 表示向量与特征标的完全性关系，不 可约表示的个数定理.....	(134)
§6 特征标表的计算.....	(139)
§7 投影算符，不可约表示基函数的选取.....	(144)
§8 矩阵的直和与直积.....	(150)
§9 表示的直积及其约化.....	(156)
§10 直积群的表示.....	(159)
§11 循环群的表示.....	(163)
习 题.....	(167)
第五章 晶体点群与分子点群.....	(169)
§1 旋转群 $O(3)$	(169)
§2 点 群.....	(177)
§3 三十二个晶体点群.....	(178)
§4 晶体点群的合成群列.....	(187)

§5	晶系及晶体点群符号表	(189)
§6	晶体点群的直积分解	(191)
§7	晶体点群的特征标表	(192)
§8	分子点群	(202)
习 题		(206)
第六章	有限群在物理学中的应用	(207)
§1	关于“相对论量子力学中狄拉克矩阵 阶数唯一性”的群论证明	(207)
§2	狄拉克群的忠实的不可约表示——狄拉克矩 阵群与 γ 矩阵	(212)
§3	红外光谱中的三类群论判据	(217)
§4	群的特征标判据及其在物理中的应用	(232)
第七章	李群的基本理论	(246)
§1	拓扑群与李群	(246)
§2	李群的生成元	(257)
§3	李代数、李群的表示	(268)
§4	李代数的标准形式	(274)
习 题		(281)
第八章	三维转动群$SO(3)$和二维特殊 酉群$SU(2)$	(282)
§1	轴转动群 $SO(2)$	(282)
§2	三维转动群 $SO(3)$	(287)
§3	二维特殊酉群 $SU(2)$	(295)
§4	$SO(3)$ 群的不可约表示	(302)
§5	$O(n)$ 、 $SO(n)$ 、 $U(n)$ 与 $SU(n)$ 群	(308)
§6	标量场与旋量场	(317)

习 题	(325)
第九章 量子力学中的群论	(326)
§1 量子力学中的希尔伯特空间	(327)
§2 哈密顿算符对称群	(337)
§3 哈密顿算符对称群与哈密顿算符的 分块对角化	(342)
§4 微扰和能级的分裂、选择定则	(347)
§5 时间反转对称性和空间反演对称性	(354)
§6 原子的对称性、塞曼效应	(363)
§7 角动量加法	(372)
§8 不可约张量算符，维格纳——艾卡特定理	(385)
§9 选择定则的分类与计算	(400)
习 题	(411)
参考书目	(414)

第一章 集合论概述

作为群论学习的基础，本章介绍了集合、映射、同态、同构、分类等几个近世代数中的基本概念。

§1 集合的概念和集合的运算

1.1 集合的基本概念

若干个(有限的或无限的)指定事物的全体，叫做一个集合。或简单的叫做集。

譬如，全体整数组成一个集合，叫做整数集，用 Z 表示；全体实数组成的集合，叫实数集，用 R 表示；全体复数组成的集合，叫复数集，用 C 表示。

构成集合 A 的事物称为 A 的元(或元素)。

显然，“事物 a 是 A 的元素”和“ a 属于 A ”是一回事，我们用记号 $a \in A$ 表示 a 属于 A 。记号“ \in ”读作：属于。若 a 不是 A 的元素或 a 不属于 A 时，以记号 $a \notin A$ 表示，“ \notin ”读作：不属于。

一个集合所包含的元的个数假如是有穷个，就叫做有穷集，否则叫做无穷集。一个集合所包含的元的个数，叫做这个集合的基数或势。

集合的表示方法有两种：

1. 集合用列举它的所有元素来表示，譬如整数集 Z 可以写成：

$$Z = \{ 0, 1, -1, 2, -2, \dots \}$$

或 $Z = \{ \dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots \}$

一般，假如集合 A 含有元 $a, b, c \dots$ ，就用记号 $A = \{ a, b, c, \dots \}$ 表示。

2. 集合用其元和元所满足的条件(或元所具有的性质)来表示。譬如所有大于0且小于或等于2的实数构成的集合 S ，可用下面记号来表示：

$$S = \{ x : 0 < x \leq 2 \}$$

右边括号表示一个集合，这一集合由满足条件 “ $0 < x \leq 2$ ” 的一切 x 所组成的，把条件写在括号内右侧，把元写在括号内左侧，中间用 “ $:$ ” 把它们分开。

一般，设集合 $S = \{ x : P(x) \}$ ，它表示 S 是由满足条件 $P(x)$ 或具有性质 P 的那些元素 x 所组成的集合。

空集 一个元也没有的集合，也认为是集合的一种，叫做空集，记作 \emptyset 。要注意” $\{ 0 \}$ 不是空集，因为它是由一个元素 0 所组成的，所以并不空。

1.2 集合的运算

子集与包含集 设有两个集合 A 和 B ，如果 A 中的每一个元素都是集合 B 中的元素，就说集合 B 包含集合 A 。即

若 $a \in A$ ，必有 $a \in B$ ，就说 $A \subset B$ 或 $B \supset A$

记号 “ $B \supset A$ ” 读作 “ B 包含 A ”， “ $A \subset B$ ” 读作 “ A 包含于 B ”。或者

若 $a \in A \Rightarrow a \in B$ (“ \Rightarrow ” 表示 “蕴涵”)，就说 $A \subset B$ 或 $B \supset A$ ，这时， A 叫做 B 的子集， B 又叫做 A 的包含集。

集合的相等 如果集合 A 中的所有元素都属于集合 B ，

同时 B 中的所有元素又都属于 A ，即

$$A \subset B \quad B \supset A$$

也就是说， A 中的元与 B 中的元完全相同，我们就说 A 与 B 相等，记为

$$A = B$$

在集合论中，当证明两个集合 A 和 B 相等时，常常先证明 $A \subset B$ ，再证明 $B \subset A$ 。

由“包含”和“相等”的概念，可知以下显而易见的事实：

(i) $\emptyset \subset A$ ，即任意集合都包含空集，

(ii) $A \subset B \ \& \ B \subset C \Rightarrow A \subset C$ ，

(iii) $A \subset A$ ，即任何集合 A 包含它自身。

假如 $A \subset B$ ，但 $A \neq B$ ，那么 A 就叫做 B 的真子集，用记号

$$A \subset B \quad \text{或} \quad B \supset A$$

表示，这时 A 的所有元都属于 B ，但 B 中至少有一个元 y 不属于 A 。真子集与包含集的关系可用(图1-1)表示。例如有理数集 Q 就是实数集 R 的一个真子集。

上面介绍了包含和相等的概念，现在进一步介绍集合的三种运算法则：

定义 1 假如 A 、 B 是两个集合，那么属于 A 或属于 B 的所有元素组成的集合 S ，叫做 A 与 B 的 和集(或称并集)。用

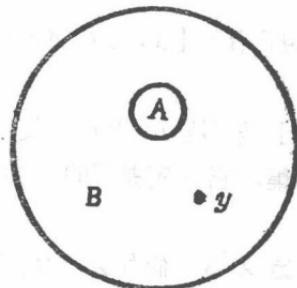


图1-1

记号

$$S = A \cup B = \{ x : x \in A \text{ 或 } x \in B \}$$

表示。于是 S 是 A 、 B 的包含集，即 $A \subset A \cup B$, $B \subset A \cup B$ ，
并且是包含 A 、 B 的最小集。

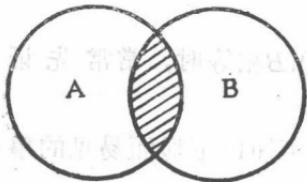


图 1-2

$$A \cup B$$

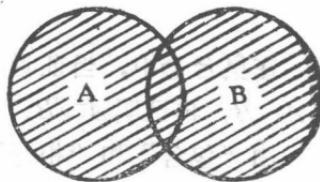


图 1-3

$$A \cup B$$

定义 2 假如 A , B 是两个集，那么属于 A 同时又属于 B 的所有元素组成的集 P ，叫做 A 与 B 的交集，用记号

$$P = A \cap B = \{ x : x \in A \& x \in B \}$$

表示。

图 1-4

$$A - B$$

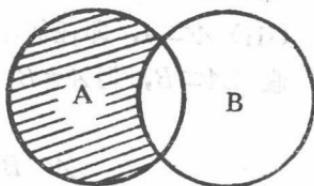
于是 P 是 A , B 的子集，并且任何集只要它同时是 A , B 的子集，它一定是 P 的子集，因此 P 是包含在 A 、 B 中的最大集。

定义 3 假如 A , B 是两个集，那么属于 A 同时又不属于 B 的所有元形成的集 D ，叫做 A 与 B 的差集，用记号

$$D = A - B = \{ x : x \in A \& x \notin B \}$$

表示。

关于交集、和集与差集的概念，用文氏图形(图1-2、图



1-3和图1-4) 表示时, 直观明显。

现在讨论和集(\cup)与交集(\cap)的基本性质

假如 A 、 B 、 C 是三个集合, 它们的交集与并集有以下关系:

交换律 $A \cap B = B \cap A$ $A \cup B = B \cup A$

结合律 $(A \cap B) \cap C = A \cap (B \cap C)$

$$(A \cup B) \cup C = A \cup (B \cup C)$$

分配律 $(A \cup B) \cap C = (A \cap C) \cup (B \cap C)$

$$(A \cap B) \cup C = (A \cup C) \cap (B \cup C)$$

吸收律 $(A \cup B) \cap A = A$, $(A \cap B) \cup A = A$

下面用集合论的方法证明

$$(A \cup B) \cap C = (A \cap C) \cup (B \cap C)$$

证明 (i) 先证明

$$(A \cup B) \cap C \subset (A \cap C) \cup (B \cap C)$$

设 $x \in (A \cup B) \cap C \Rightarrow x \in A \cup B \ \& \ x \in C$

$$\Rightarrow x \in A \text{ 或 } x \in B \ \& \ x \in C$$

$$\Rightarrow x \in A \cap C \text{ 或 } x \in B \cap C$$

$$x \in (A \cap C) \cup (B \cap C)$$

$$\therefore (A \cup B) \cap C \subset (A \cap C) \cup (B \cap C) \quad (1.1)$$

(ii) 再证明

$$(A \cap C) \cup (B \cap C) \subset (A \cup B) \cap C$$

设 $x \in (A \cap C) \cup (B \cap C) \Rightarrow x \in (A \cap C) \text{ 或 } x \in (B \cap C)$

现在有(且仅有)两种可能:

$$\begin{aligned}
 \text{一种: } x \in (A \cap C) &\Rightarrow x \in A \& x \in C \\
 &\Rightarrow x \in A \cup B \& x \in C \\
 &\Rightarrow x \in (A \cup B) \cap C
 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
 \text{另一种: } x \in B \cap C &\Rightarrow x \in B \& x \in C \\
 &\Rightarrow x \in A \cup B \& x \in C \\
 &\Rightarrow x \in (A \cup B) \cap C
 \end{aligned}$$

于是, 不论在那种情况下, 都有 $x \in (A \cup B) \cap C$

$$\therefore (A \cap C) \cup (B \cap C) \subset (A \cup B) \cap C \quad (1.2)$$

由(1.1)与(1.2)式可知

$$(A \cup B) \cap C = (A \cap C) \cup (B \cap C) \quad \text{证毕}$$

对于差集, 还可得出:

$$\begin{aligned}
 N \cap (M - N) &= \emptyset \\
 M &= (M \cap N) \cup (M - N).
 \end{aligned}$$

1.3 补集、和交关系

现讨论补集。设 S 是一个集合, A 是 S 的一个子集, 即 $A \subset S$ 。作

$$A^c = \{ x: x \in S \& x \notin A \}$$

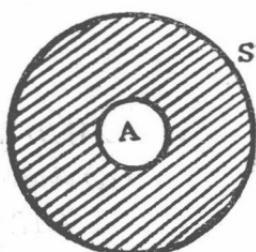
我们称 A^c 是 A 在 S 中的补集 (或余集)。直观地说, 余集 A^c 就是 S 中除掉 A 以外余下来的集(图1-5)。因此, 可记为

$$A^c = S - A$$

关于补集运算 “ C ” 有下

列所谓德摩根(De Morgan)公式

$$(A \cup B)^c = A^c \cap B^c, (A \cap B)^c = A^c \cup B^c$$



划线区域 = A^c

图 1-5

$$A^c = A \quad A \cup A^c = S \quad A \cap A^c = \emptyset$$

头两个公式，又叫做和交关系，是集合论中的重要公式。这些公式用图形都不难加以验证。这里仅用集合论的方法对第一个公式加以证明。

求证 $(A \cup B)^c = A^c \cap B^c$ ，即和集的补集等于各个补集的交。

证明 先证 $(A \cup B)^c \subset A^c \cap B^c$

$$\begin{aligned} \text{设 } x \in (A \cup B)^c &\implies x \in S, x \notin A \cup B \\ &\implies x \in S, x \notin A \& x \notin B \\ &\implies x \in A^c \& x \in B^c \\ &\implies x \in A^c \cap B^c \end{aligned}$$

$$\therefore (A \cup B)^c \subset A^c \cap B^c \tag{1.3}$$

再证 $A^c \cap B^c \subset (A \cup B)^c$

$$\begin{aligned} \text{设 } x \in A^c \cap B^c &\implies x \in A^c \& x \in B^c \\ &\implies x \in S, x \notin A \& x \notin B \\ &\implies x \in S, x \notin A \cup B \\ &\implies x \in (A \cup B)^c \end{aligned}$$

$$\therefore A^c \cap B^c \subset (A \cup B)^c \tag{1.4}$$

由(1.3)和(1.4)式，可知：

$$(A \cup B)^c = A^c \cap B^c$$

证毕

1.2 集合的直积

定义 A, B 两个集结的直积为

$$A \otimes B = \{(a, b) : a \in A, b \in B\}$$

式中 (a, b) 表示元素 a, b 的有序对。即在集 A 中取一个元素 a ，又在集 B 中取一个元素 b ，把它们搭配成对 (a, b) 。注意，搭配中， a 在前， b 在后，次序不能调换。所有这种有序

对 (a, b) 的全体构成一个集合，这个集合就是直积集合 $A \otimes B$ 。也可简记为 $A \times B$ 。

例1 设 $A = \{0, 1\}$ 、 $B = \{a, b, c\}$ ，那么

$$A \otimes B = \{(0, a), (0, b), (0, c), (1, a), (1, b), (1, c)\}$$

$$B \otimes A = \{(a, 0), (b, 0), (c, 0), (a, 1), (b, 1), (c, 1)\}$$

例2 设 R 是实数集，那么

$$R^3 = R \otimes R \otimes R = \{(x, y, z) : -\infty < x < +\infty, \\ -\infty < y < +\infty, -\infty < z < +\infty\}$$

就是通常的三维欧氏空间

$$\begin{aligned} R^n &= \underbrace{R \otimes R \otimes \cdots \otimes R}_{n \text{个}} \\ &= \{(x_1, x_2, \dots, x_n) : -\infty < x_1 < +\infty, \dots \\ &\quad -\infty < x_n < +\infty\} \end{aligned}$$

就是通常的 n 维欧氏空间。

§2 映 射

映射这个概念的重要用途之一，是解决两个集合的比较问题。

设 A 和 B 是两个集合。对 A 内每一个元素 $a \in A$ ，如果根据某一对应关系或法则 f ，可以使它与 B 中唯一一个元素 b 对应，那么这个对应或法则 f ，叫做从 A 到 B 的映射。记为

$$f : A \rightarrow B \text{ 或 } b = f(a) \quad (\text{图1-6})$$

b 称为元 a 的象， a 叫做 b 的象源。集合 A 称为映射 f 的定义域，由所有的象 $f(a)$ 组成的集合称为 f 的值域，记为