# 物理学中的群论

上册　　陶瑞宝编著

上海科学技术出版社

# 物理学中的群论

## 上册

陶瑞宝 编著

上海科学技术出版社

## 内 容 提 要


本书介绍了有限群、李群和李代数的基本理论，并对物理上遇到的一些重要群的结构和表示都作了比较详细的叙述。其中包括点群、空间群、磁点群、磁空间群、置换群，$SU(2)$群、$E(3)$群、双值旋转群和双值点群、Lorentz 群、$C_2$群、$GL(M)$群和 $SU(M)$群等。

本书可作为物理专业的高年级学生和研究生的教材和教学参考书，也可供物理工作者、化学工作者参考。



责任编辑　戴雪文

**物理学中的群论**

上　册

陶瑞宝　编著

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　上海商务印刷厂印刷

开本 850×1156 1/32　印张 20.25　字数 286,000

1986 年 5 月第 1 版　1986 年 5 月第 1 次印刷

印数：1—6,000

统一书号：13119·1230　　定价：4.95 元

# 作 者 序

“群论”现已成为研究物理学必不可少的一种工具。在物理学研究的各个层次：基本粒子、原子核、原子、分子、固体和天体物理，都有着广泛的应用，并且越来越成为一切物理工作者——理论的和实验的——通用语言。从1977年起，我为复旦大学理论物理的研究生和一些教师讲授这门课，但当时想找一本在基本理论上比较严谨，所涉及的群比较全面，既讲群的表示又讲群的结构方面的书，遇到一定的困难，所以编写了一份讲义。本书就是在这份讲义的基础上作了一些修改和补充之后完成的。

在内容上，本书的第一章介绍了一些基本的数学预备知识，在阅读本书时，用到的有关线性代数和线性算子的基本知识大致上已总结在这一章里了。因此阅读本书时，除还需要一点量子力学的知识外，很少需要其他的高等数学知识。至于连续群部份，它的一般理论要涉及到拓扑学知识，因此在第十二章的第一、二节十分扼要地叙述了有关拓扑的一些定义、名称以及作为拓扑群的一些基本定理，在尽可能不用深的知识和少占篇幅的情况下，给予必要的证明。我想对于学习李群的一些读者，即使他们只对应用感兴趣，但粗浅地知道一下它的拓扑性还是有好处的，因为这对深入研究或阅读其他有关李群的专门书籍是有帮助的。对拓扑不感兴趣的读者，可略去这两节，直接从第3节开始阅读。

在点群、空间群结构的推导上，交替使用了几何和代数的方法，象14种空间群晶格型式的推导借用几何的方法，因此比较直观；而230种空间群的推导（同一种型式，不同空间群的推引）就用了代数方法，它似乎比较简洁。

在介绍空间群的不可约表示理论时，从诱导表示和投影表示

的理论出发，比较严密地推导和论证了空间群不可约表示的完全性和不可约性。此外，为说明如何从 Kovalev 表格来建造空间群的不可约表示，还详细地介绍了两个例子。这在应用时显得特别重要，因为往往有些人学了空间群的表示论，还不太会从允许的小表示自己建造一个空间群的不可约表示矩阵。我想书中的两个例子：简单空间群 $O_h^5$ 和非简单空间群 $O_h^3$ 的一些对称点诱导的不可约表示矩阵的建造，将有助于读者具体地掌握空间群的表示理论。

本书分上下两册，上册内容的安排如下：第二、三、七章是关于有限群的基本理论，不过第七章的诱导表示和投影表示理论主要用在空间群的表示方面(包括磁空间群)，所以把它与二、三、四章分开，放到紧靠空间群表示论那一章；第四章是群论与量子力学的联系，其中许多都是涉及基本原理方面的。第五、六、八、九、十和十一章是有关点群、空间群、磁点群、磁空间群和置换群的理论，这些群都可归在有限群理论范畴。第十二章至十六章是关于连续群的理论，主要就是李群和李代数的理论。下册的内容是关于在分子与固体物理中的应用。

上册参考了 M. Hamermesh、E. P. Wigner、S. L. Altmann、C. J. Bradley 和 A. P. Cracknell、万哲先、B. G. Wybourne 等人的著作，特别是第十一章，主要参考了 Hamermesh 的著作。有关磁空间群结构的一些表格和内容主要取材于 Bradley 和 Cracknell 的著作。当然，书中也有一些方法是编者自己的。

由于编者学识浅陋，书中难免有错误和不当之处，恳请读者随时赐予批评指正！

陶瑞宝

1982 年于复旦大学

# 目　　录

# 第一章

## 线性代数基础

### §1.1 集合、关系、映照

**(一)集合**

在数学的一切领域，都要用到集合这个概念。直观上，这个概念是很容易被大家所了解的。例如我们要研究某一班级中学生的学习情况，我们就可以把这个班级中学生的全体当作为一个集合，而属于这个班级中的学生就称为这个集合的*元素*。又如数论中，把所有自然数全体作为一个集合，每个自然数就是属于这个自然数集合的元素。因此集合的概念是人们把所研究的对象全体抽象成一个整体而引入的，每一个研究的对象都是属于此全体的一个成员，把全体称为集合，把成员称为集合中的元素。我们常常用大写字母 $\boldsymbol{A}, \boldsymbol{B}, \boldsymbol{X}, \boldsymbol{Y}, \cdots\cdots$ 来标记集合；用小写字母 $\boldsymbol{a}, \boldsymbol{b}, \boldsymbol{x}, \boldsymbol{y}, \cdots\cdots$ 来标记元素；用 $\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}$ 来标记元素 $\boldsymbol{a}$ 属于集合 $\boldsymbol{A}$；用 $\boldsymbol{a}\notin\boldsymbol{B}$ 来标记元素 $\boldsymbol{a}$ 不属于集合 $\boldsymbol{B}$。用 $\boldsymbol{R}$ 来标记集合时是指由实数全体所组成的集合，常称*实数域*或*实域*；用 $\boldsymbol{C}$ 来标记集合时是指由复数全体所组成的集合，常称*复数域*或*复域*。一个元素也没有的集合称为*空集*，常记作 $\emptyset$。

对于一个特定的集合，通常有二种标记方法：一种方法是把这个特定的集合中的所有元素都列出来，象实域 $\boldsymbol{R}$ 中由元素 1, 3, 9, 14 这四个元素所组成的集合 $\boldsymbol{A}$ 可记为：

$$\boldsymbol{A}=\{1, 3, 9, 14\} \tag{1-1}$$

这种记法往往对于元素较少的简单集合比较适用。另一种记法是

$$\boldsymbol{B}=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{X}, P(\boldsymbol{x})\} \tag{1-2}$$

它是表示集合 $\boldsymbol{B}$ 是由那些属于 $\boldsymbol{X}$ 且使命题 $P(\boldsymbol{x})$ 成立的元素组成，例如

$$\{1,\ -1\}=\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{R},\ \boldsymbol{x}^2=1\},$$

现在关于 $\boldsymbol{x}$ 的命题 $P(\boldsymbol{x})$ 是 $\boldsymbol{x}^2=1$。从上面的二个例式(1-1)和(1-2)，很自然地看到，集合 $\boldsymbol{A}$ 是属于实数集合 $\boldsymbol{R}$ 的，集合 $\boldsymbol{B}$ 是属于集合 $\boldsymbol{X}$ 的。我们称 $\boldsymbol{A}$ 是 $\boldsymbol{R}$ 的子集，$\boldsymbol{B}$ 是 $\boldsymbol{X}$ 的子集，记作 $\boldsymbol{A}\subset\boldsymbol{R}$ 和 $\boldsymbol{B}\subset\boldsymbol{X}$。由此我们可以对子集下一个定义。

**子集** 凡属集合 $\boldsymbol{A}$ 中的任何元素必属集合 $\boldsymbol{B}$，则 $\boldsymbol{A}$ 称为 $\boldsymbol{B}$ 的子集，记作 $\boldsymbol{A}\subset\boldsymbol{B}$。

如果我们记 $\forall\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}$ 表示 $\boldsymbol{A}$ 中所有元素 $\boldsymbol{a}$，那末上述子集的定义可以用数学式表成：$\forall\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}\Rightarrow\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{B}$，则 $\boldsymbol{A}\subset\boldsymbol{B}$。这里“$\Rightarrow$”代表由左边的性质必导至右边的性质。如果由左边性质导至右边性质，又由右边性质导至左边性质，则记作“$\Leftrightarrow$”。

两个集合 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 相等，它意味着对于任意一个元素 $\boldsymbol{a}$，存在 $\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}\Leftrightarrow\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{B}$，记作 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$。因此由 $\boldsymbol{A}\subset\boldsymbol{B}$ 及 $\boldsymbol{B}\subset\boldsymbol{A}$，可知 $\boldsymbol{A}=\boldsymbol{B}$。

若一个集合中不同元素的数目是有限的，则称为**有限集**，否则称为**无限集**。

**和集** 二个集合 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的和集是指或属于 $\boldsymbol{A}$，或属于 $\boldsymbol{B}$ 的所有元素所组成的集合(见图 1.1($a$))，记作 $\boldsymbol{A}\cup\boldsymbol{B}$。数学符号可记为

$$\boldsymbol{A}\cup\boldsymbol{B}=_D\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{A}\ \text{或}\ \boldsymbol{x}\in\boldsymbol{B}\}。\tag{1-3}$$

有时简单地记为 $\boldsymbol{A}+\boldsymbol{B}$。

**交集** 二个集合 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 的交集是指既属于 $\boldsymbol{A}$ 同时又属于 $\boldsymbol{B}$ 的所有元素所组成的集合(见图 1.1($b$))，记作 $\boldsymbol{A}\cap\boldsymbol{B}$，有

$$\boldsymbol{A}\cap\boldsymbol{B}=_D\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in A\ \text{并}\ \boldsymbol{x}\in B\}。\tag{1-4}$$

**差集** $\boldsymbol{A}$ 与 $\boldsymbol{B}$ 的差集是指属于 $\boldsymbol{A}$ 但不属于 $\boldsymbol{B}$ 的元素所组成的集合，记为 $\boldsymbol{A}\backslash\boldsymbol{B}$，有

$$\boldsymbol{A}\backslash\boldsymbol{B}=_D\{\boldsymbol{x}:\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{A},\ \boldsymbol{x}\notin\boldsymbol{B}\},\tag{1-5}$$

又称为集合 $\boldsymbol{B}$ 相对于 $\boldsymbol{A}$ 的余集(见图 1.1($c$))。有时简单地记为

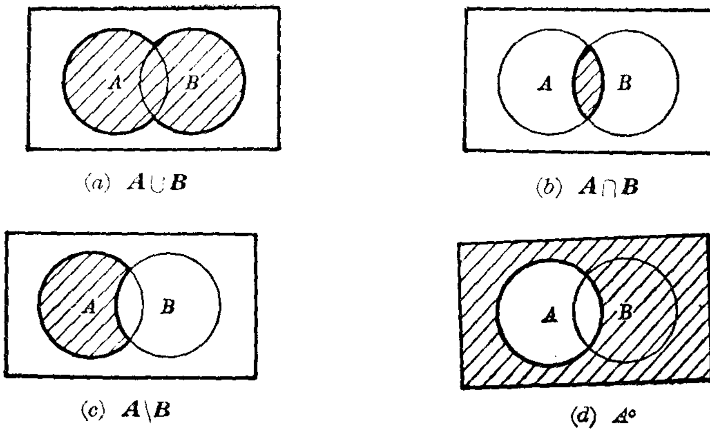


图1.1　$A\cap B$, …, $A^c$ 等由阴影部分代表

$B-A$。

余集　集合 $A$ 的余集是由那些不属于 $A$ 的元素所组成的(见图 1.1($d$)),记为 $A^c$,有

$$A^c =_D \{x : x \notin A\} \tag{1-6}$$

从上面的定义,我们立即可知: $A\cup A=A$, $A\cap A=A$。

直积集　集合 $A$ 和 $B$ 的直积是一个集合,这一集合中的元素是一个有序对$(a, b)$,其中第一个元素 $a$ 是规定一定属于集合 $A$ 的,而第二个元素 $b$ 一定是属于集合 $B$。记此直积集合为 $A\times B$,有式

$$A\times B =_D \{(a, b) : a\in A,\ b\in B\}。 \tag{1-7}$$

在 $A\times B$ 中二个元素$(a, b)$和$(c, d)$相等,意味着

$$(a, b)=(c, d) \Leftrightarrow a=c,\ b=d。$$

例如,我们有二个点集 $A=\{2, 5, 7\}$, $B=\{3; 6\}$, 则 $A\times B$ 直积集包含如下 6 个元素: (2, 3), (2, 6), (5, 3), (5, 6), (7, 3)和(7, 6)。又如实平面是 $R^2=R\times R$。我们也可把直积的概念推广到包含 $n$ 个集合 $A_1$, …, $A_n$ 的情况,可记为

$$A_1\times A_2\times\cdots\times A_n \text{ 或 } \prod_{i=1}^{n} A_i,$$

它的元素是由 $n$ 个有次序的元素组成: $(a_1, a_2, \cdots, a_n)$, 每个 $a_i$

$\in A_i$。我们可以写成

$$A_1 \times A_2 \times \cdots \times A_n$$
$$=_D\{(a_1, a_2, \cdots, a_n): a_1 \in A_1, a_2 \in A_2, \cdots, a_n \in A_n\}。$$

**内直积集** 集合 $A$ 的内直积集 $A \boxtimes A$ 定义如下：

$$A \boxtimes A = \{(a, a): a \in A\}。 \quad (1\text{-}8)$$

内直积集是集合 $A$ 与自身的直积的一个子集。

**直和集** 两个不相交的集合 $A$ 和 $B$ 的和集，可以定义为 $A$ 和 $B$ 的直和集，记作

$$A \oplus B =_D A \cup B, \ (A \cap B = \emptyset)。$$

$n$ 个互不相交的集合 $A_1$、$A_2$、…、$A_n$ 的直和集记作

$$\sum_{i=1}^{n} {}^{\oplus} A_i = A_1 \oplus A_2 \oplus \cdots \oplus A_n$$

**(二)等价关系**

集合 $A$ 中两元素 $a$ 和 $b$ 之间定义一种关系使它们联系起来，记作 $aRb$，表示元素 $a$ 和 $b$ 通过"关系 $R$"联系起来。例如 $A$ 是实数集，定义"大于"关系："$R$ 是 $>$"，则可以把 $A$ 集合中的任意两个数(如 8 与 12)联系起来，有 $12>8$ 的关系等等。进一步如果我们定义的关系满足下面三条等价的公理，则称此关系 $R$ 为**等价关系**，记作"$\sim$"。

1) 反射律：$aRa$，记作 $a \sim a$，$a \in A$。

2) 对称律：$aRb \Rightarrow bRa$，$a$，$b \in A$。记作 $a \sim b \Rightarrow b \sim a$。

3) 传递律：$aRb$，$bRc \Rightarrow aRc$，$a$，$b$，$c \in A$。记作

$$a \sim b, \ b \sim c \Rightarrow a \sim c。$$

例如：实数集合中数相等的关系{$R$ 是"$=$"}是一个等价关系，满足上面的三条等价公理。但"$>$"，"$<$"等关系不是等价关系，因为没有对称律。

当我们在集合 $A$ 中定义了一种等价关系 $R$ 后，$A$ 中的任一元素 $a$，就有一个等价类$[a]$，它是与 $a$ 等价的所有元素组成的集合：

$$[\boldsymbol{a}]=\{x:x\sim a;\ x,\ a\in A\},\ [a]\subset A。$$

由等价公理,我们立即有下面的定理:

**定理1** 设 $R$ 是 $\boldsymbol{A}$ 中的一个等价关系,$[\boldsymbol{a}]$是 $\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}$ 的等价类,则

1) 任一 $\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}$,$\exists[\boldsymbol{a}]$,有 $\boldsymbol{a}\in[\boldsymbol{a}]$。即 $\boldsymbol{A}$ 中每一元素一定属于某一个等价类。

2) $[\boldsymbol{a}]=[\boldsymbol{b}]$,假使且仅假使 $a\sim b$。即二个等价类相等的充要条件是二个类中的二个元素等价。

3) 若$[\boldsymbol{a}]\neq[\boldsymbol{b}]$,则$[\boldsymbol{a}]\cap[\boldsymbol{b}]=\emptyset$。即二个不相等的等价类是不相连接的。以后我们称 $\boldsymbol{A}\cap\boldsymbol{B}=\emptyset$ 的集合 $\boldsymbol{A}$ 和 $\boldsymbol{B}$ 是不相连接的。这个定理的证明留给读者作为一个练习。由 2)及 3),我们看到 $\boldsymbol{A}$ 中的二个等价类要末全等,要末全不等,不可能部分重合,加上 1),因此我们可以把集合 $\boldsymbol{A}$ 按照等价关系 $R$ 来划分 $\boldsymbol{A}$ 中的元素,把 $\boldsymbol{A}$ 分成一些不同的等价类$[\boldsymbol{a}_i]$:

$$\boldsymbol{A}=\bigcup_{i=1}^{p}[\boldsymbol{a}_i]=\sum_{i=1}^{p}{}^{\oplus}[\boldsymbol{a}_i],\ [\boldsymbol{a}_i]\cap[\boldsymbol{a}_j]=\emptyset\ (i\neq j)。\qquad(1\text{-}9)$$

如果我们把每一个等价类当作一个元素,所有不同等价类的全体构成一个集合,这个集合称为集合 $\boldsymbol{A}$ 对关系 $R$ 的商集,记作 $\dfrac{\boldsymbol{A}}{R}$,

$$\frac{\boldsymbol{A}}{R}=\{[\boldsymbol{a}]:\boldsymbol{a}\in\boldsymbol{A}\}。\qquad(1\text{-}10)$$

在商集的定义中,关系 $R$ 必须是一个等价关系。

现在我们来举一个例子:设 $\boldsymbol{Z}$ 是整数集合,$R_5$ 是 $\boldsymbol{Z}$ 中的一个关系,即:$\boldsymbol{x}\in\boldsymbol{Z}$,$\boldsymbol{y}\in\boldsymbol{Z}$,若 $\boldsymbol{x}\overset{R_5}{\sim}\boldsymbol{y}$,意味着 $\boldsymbol{x}-\boldsymbol{y}$ 可以被 5 除得尽。这个关系 $\boldsymbol{x}\overset{R_5}{\sim}\boldsymbol{y}$ 常习惯地写成

$$\boldsymbol{x}=\boldsymbol{y},\ (\mathrm{mod}\,5)$$

这样定义的 $R_5$ 显然是满足三条等价公理,所以是一个等价关系,$\boldsymbol{Z}$ 可以按 $R_5$ 分成 5 个不同的等价类:

$$
\begin{aligned}
[0] &= \{\cdots, -10, -5, 0, 5, 10, \cdots\} \\
&= [-10] = [-5] = [5] = [10] = \cdots; \\
[1] &= \{\cdots, -9, -4, 1, 6, 11, \cdots\} \\
&= [-9] = [-4] = [6] = [11] = \cdots; \\
[2] &= \{\cdots, -8, -3, 2, 7, 12, \cdots\} \\
&= [-8] = [-3] = [7] = [12] = \cdots; \\
[3] &= \{\cdots, -7, -2, 3, 8, 13, \cdots\} \\
&= [-7] = [-2] = [8] = [13] = \cdots; \\
[4] &= \{\cdots, -6, -1, 4, 9, 14, \cdots\} \\
&= [-6] = [-1] = [9] = [14] = \cdots。
\end{aligned}
$$

$$\boldsymbol{Z} = [0] \cup [1] \cup [2] \cup [3] \cup [4]。$$

商集 $$\frac{\boldsymbol{Z}}{\boldsymbol{R}} = \{[0], [1], [2], [3], [4]\}。$$

(三)映照

令 $\boldsymbol{X}$, $\boldsymbol{Y}$ 是二个非空的集合，若存在一种规则 $f$，使得 $\boldsymbol{X}$ 中的任一元素 $\boldsymbol{x}$ 在规则 $f$ 下确定 $\boldsymbol{Y}$ 中的唯一元素 $\boldsymbol{y}$ 与它对应，则我们称此规则 $f$ 为 $\boldsymbol{X}$ 到 $\boldsymbol{Y}$ 的映照，记作

$$f: \boldsymbol{X} \to \boldsymbol{Y} \text{ 或 } \boldsymbol{X} \xrightarrow{f} \boldsymbol{Y}$$

并称元素 $\boldsymbol{y}$ 是在 $\boldsymbol{x}$ 处 $f$ 的值(或象)，记为 $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{x})$。称所有满足 $\boldsymbol{y} = f(\boldsymbol{x})$ 的 $\boldsymbol{x}$ 全体为 $\boldsymbol{y}$ 的原象，$\boldsymbol{X}$ 为 $f$ 的定义域，而所有元素 $\boldsymbol{x}$ 的象 $\boldsymbol{y}$ 的全体

$$f(\boldsymbol{X}) = \{f(\boldsymbol{x}) : \boldsymbol{x} \in \boldsymbol{X}\}$$

为 $f$ 的值域。

如果 $\boldsymbol{X}$ 与 $\boldsymbol{Y}$ 都是实数集 $\boldsymbol{R}$，那末 $f$ 就是数学分析中大家熟知的实函数。

现在设存在映照 $f: \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{B}$, $g: \boldsymbol{B} \to \boldsymbol{C}$, 则存在一个映照把 $\boldsymbol{A}$ 中的任一元素 $\boldsymbol{a}$ 映照到 $\boldsymbol{C}$ 中元素 $g(f(\boldsymbol{a}))$。定义此映照为 $g \cdot f: \boldsymbol{A} \to \boldsymbol{C}$，使 $(g \cdot f)(\boldsymbol{a}) = g(f(\boldsymbol{a}))$。我们称 $g \cdot f$ 是映照 $f$ 和 $g$ 的乘积。同样可定义 $n$ 个映照的乘积。