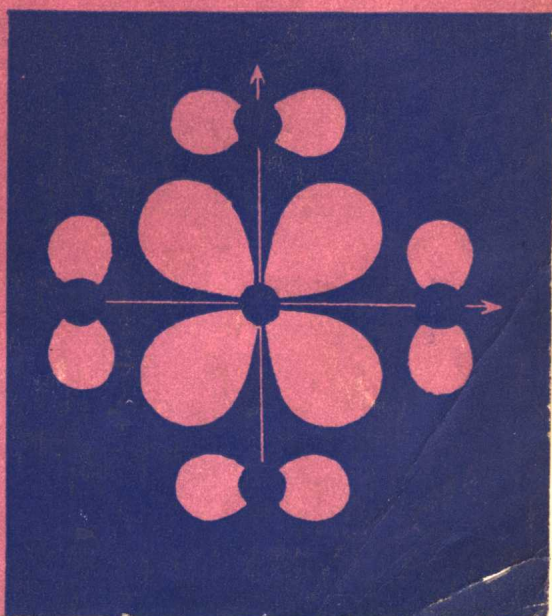
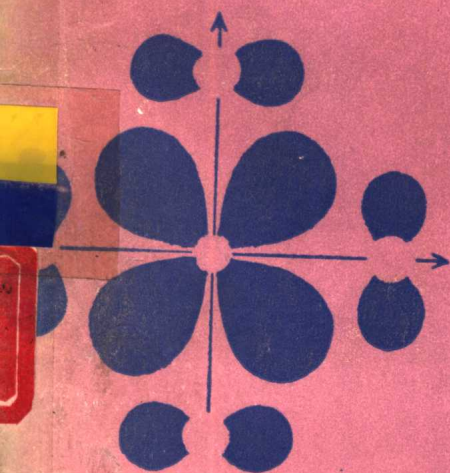


● 丁培柱 王毅 编

群及其表示



高等教育出版社

群 及 其 表 示

丁培柱 王 毅

高等教育出版社

本书是为物理系各专业及化学系某些专业编写的学习“群论”的一本入门书,是编者多年来在为物理系及化学系研究生和高年级大学生讲授“群论”的教学实践中逐步形成的。

本书主要介绍群与群表示论的基本知识及简单应用。共分六章:第一章介绍抽象群的基本概念;第二章较全面、系统地介绍有限群的表示理论;第三章介绍点群及其表示,平移群和空间群及晶体的对称性;第四章介绍置换与置换群,置换群表示的Young图方法及应用;第五章介绍李群的基本概念和理论,较仔细地讨论了 $SO(3)$ 与 $SU(2)$ 群的表示;第六章介绍群论应用于物理及化学问题的几个典型例子。最后三个附录简要介绍集合与映射、矩阵、线性空间与线性算符的有关知识。每章都配备了习题,书后附有习题解答提示。

本书可作为物理系及化学系有关专业高年级大学生和研究生的教材,也可供有关科技工作者参考。

群及其表示

丁培柱 王毅

*

高等教育出版社出版

新华书店总店北京科技发行所发行

国防工业出版社印刷厂印刷

*

开本 850×1168 1/32 印张 15 字数 360 000

1990年5月第1版 1990年5月第1次印刷

印数 0001—1160

ISBN 7-04-002830-1/O·892

定价 3.55 元

前 言

本教材是原教育部(现为国家教育委员会)1984年下达的《高等学校理科数学、计算数学、力学选修课教材选题规划》中的一种,是为物理类各专业及化学类某些专业编写的,是学习《群论》的一本入门书,供上述各专业的研究生和高年级大学生作为教材,也可供需要群论的科技工作者自学和参考。

多年来我们曾为物理系与化学系的研究生和大学生开设“群论”课,在教学实践中逐渐形成了一本讲义。本教材就是以我们的讲义为蓝本,依据高等学校理科数学、力学教材编审委员会高等数学编审组的要求和意见经过几次修改、试用而定稿的。我们衷心感谢高等数学编审组和审阅过书稿及“编写提纲”的老师,衷心感谢吉林大学及许多兄弟院校的老师,他们曾提出过许多宝贵的意见和建议。我们特别感谢吉林大学吴式枢教授,我们的“群论”课教学与教材编写工作就是在吴老师的热情鼓励下开始的。

由于我们的水平所限,书中不妥甚至错误之处定然不少,敬请读者批评指正。

本教材是学习“群论”的一本入门书,主要介绍群与群表示论的基本知识及简单应用。全书共分六章。第一章介绍学习本教材所需的抽象群的基本概念和理论。第二章较全面、系统地介绍有限群的表示理论,是本教材的基础与核心。第三章介绍点群及其表示,平移群和空间群及晶体的对称性。第四章介绍置换与置换群,置换群表示的 Young 图方法的理论基础及简单应用。第五章介绍李群的基本概念和理论,较仔细地讨论了 $SO(3)$ 与 $SU(2)$ 群的

表示.第六章集中了群论应用于物理与化学问题的几个典型例子,这些例子可以穿插在第二、三、四、五章的适当章节之后讲授.

学习本教材要求读者具备一定的线性代数知识.为此,我们将学习本教材必须的集合与映射、矩阵、线性空间与线性算符的有关知识编写成三个附录附在书后.

为了帮助读者更好地理解 and 掌握教材中的基本概念、理论和方法,我们除了在正文中穿插适量的例子之外,在每章之后还选编了相当数量的习题,并将答案与提示附在书后.

讲授本教材约需 68 学时左右.当学时不够时,可依据专业需要在相对独立的第三、四、五章中适当删减.

我们希望这本教材能为读者进一步学习和应用群论方法打下较坚实的基础.

丁培柱 王 毅

1987 年 11 月

目 录

第一章 抽象群	1
§ 1 群的定义	2
§ 2 子群	15
§ 3 生成元与循环群	20
§ 4 直积群	23
§ 5 共轭类	25
§ 6 同构与同态	29
§ 7 商群	33
习题一	35
参考文献	40
第二章 有限群的表示理论	41
§ 1 群的表示	41
§ 2 等价表示	54
§ 3 平均值泛函	61
§ 4 可约表示与不可约表示	64
§ 5 正交性定理与完备性定理	69
§ 6 特征标理论	82
§ 7 特征标表	91
§ 8 可约表示的约化: 投影算符法	101
§ 9 可约表示的约化: 对称化基函数法	111
§ 10 群代数与正则表示	117
§ 11 共轭表示、复共轭表示与实表示	127
§ 12 表示的直积	131
§ 13 Clebsch-Gordan 系数	136
§ 14 直积群的表示	140
习题二	146

参考文献	150
第三章 对称操作群	151
§1 对称操作	151
§2 旋转群	155
§3 全正交群	166
§4 点群	168
§5 点群的分类	175
§6 点群的不可约表示	184
§7 欧几里德群	200
§8 平移群	202
§9 空间群	211
习题三	220
参考文献	221
第四章 置换群	223
§1 置换	223
§2 置换群	234
§3 S_n 的群代数	238
§4 Young 图方法的基本定理	241
§5 Young 图方法应用于寻求置换群的不可约表示	246
§6 置换群表示的直积	258
§7 置换群表示的外积	261
习题四	268
参考文献	269
第五章 李群	271
§1 基本概念	271
§2 李群	279
§3 李群的基本理论	282
§4 平面旋转群 $R(2)$	291
§5 三维旋转群 $SO(3)$	296
§6 特殊二阶酉群 $SU(2)$	306
§7 $U(n)$ 群和 $SU(n)$ 群	317
§8 $O(n)$ 群和 $SO(n)$ 群	323

§ 9 李代数与李群的表示	327
习题五	329
参考文献	331
第六章 应用	332
§ 1 对称性与简并	332
§ 2 分支规则与能级分裂	340
§ 3 跃迁选择定则	343
§ 4 单粒子模型下的原子	347
§ 5 置换群表示的外积与斯莱特行列式	350
§ 6 直积与角动量耦合	353
§ 7 不可约张量算符	370
§ 8 多电子体系的总自旋状态	373
§ 9 氢原子的动力学对称性	386
§ 10 四面体分子 AB_4 中 A 原子的杂化波函数	393
习题六	400
参考文献	403
附录一 集合与映射	405
附录二 矩阵	413
附录三 线性空间与线性算符	425
习题解答与提示	448
参考文献	467

第一章 抽象群

群的概念形成于十九世纪初。群论的早期发展伴随着代数方程根式解的研究并最终彻底解决了这个困扰全世界数学家近二百五十年的难题^①；所有这些应归功于著名数学家高斯、拉格朗日、鲁非尼，特别是阿贝耳、伽罗华等的相继工作。群论的创立，就像解析几何与微积分的创立一样，闪耀着人类智慧的光芒。二十世纪初，以量子力学与相对论的创立为标志，物理学跨进了近代物理新时期。此后，群论一直是研究微观体系粒子运动的强有力的工具，在理论与实验研究中取得了令人惊叹的成果，吸引着越来越多的包括物理学家与化学家在内的科学工作者学习它、应用它。E. P. Wigner 最早应用群论研究原子结构与原子光谱，是将群论应用于物理学的先导，他由于对原子核与基本粒子的研究，特别是通过发现和应用基本对称性原理而作出的贡献，荣获了 1963 年度诺贝尔物理学奖^②。1981 年度诺贝尔化学奖授予了著名化学家 R. Hoffmann 和福井谦一，以表彰他们建立和发展“轨道对称和守恒性原理”的功绩^③。六十年代末对氢原子动力学对称性的研究，成功地揭开了氢原子 $n^2 = \sum_{l=0}^{n-1} (2l+1)$ 度“偶然简并”的伪装^④。1982

① 梁宗巨，〈世界数学史简编〉，辽宁人民出版社，1980，pp. 168—173。

② 吴芝兰、郑钦贵，〈诺贝尔物理学奖金获得者〉，福建教育出版社，1983，pp. 276—277。

③ 李纯仁、叶松，〈群论与化学（一）〉，〈自然杂志〉，8 卷 8 期（1985），p. 563。

④ M. J. Englefield，〈Group Theory and Coulomb Problem〉 Wiley-Interscience, New York, 1972。

年，著名化学家唐敖庆教授领导的科研集体以“配位场理论”的出色工作荣获我国首批颁发的国家自然科学一等奖^①。他们以及其他许多人的工作都以群论为工具，放射着群论思想的光彩。

许多物质的结构具有对称性，当然，对称性并不限于眼睛看得见的几何对称性，对称性还有更深刻的含意。狄拉克说过，近代物理中“规律的公式表达要求采用关于变换的数学。宇宙中的重要事物表现为这些变换中的不变量。”^②狄拉克于此说的变换的数学就是群论与算子理论，这是近代物理研究与发展中的主要数学工具。一个体系，如果它在某种变换之下不变或恢复成原来的样子，就说这个体系具有（这种变换之下的）对称性。一个体系的对称性是它的本质属性的反映，对体系的对称性的研究能够揭示出体系的本质属性。群论就是研究对称性的数学工具。正如化学家 Bell 说的那样，“无论在什么地方，只要能应用群论，立即从一切纷乱混淆中结晶出简捷与和谐。”^③目前，群论已广泛应用于物理、化学、结晶学及许多技术科学中，“群论”已成为物理各专业与化学某些专业必备的基础知识。

在这一章中，我们只讨论抽象群理论中对于学习本课程所必需的那些概念和结论。

§1 群的定义

我们先看几个例子。

例1 考虑整数集合 $Z = \{\dots, -2, -1, 0, 1, 2, \dots\}$ 。在 Z 中按通常意义规定加法“+”，则

1) 对任何 $m, n \in Z, m+n \in Z$;

① 李纯仁、叶松，群论与化学（一），《自然杂志》，8卷8期（1985），p. 563.

② P. A. M. 狄拉克，《量子力学原理》，科学出版社，1965，第一版序言，p. iv.

③ 李纯仁、叶松，同本页脚注①，p. 563.

- 2) 对任何 $m, n, p \in \mathbb{Z}$, $(m+n)+p=m+(n+p)$;
- 3) 有 $0 \in \mathbb{Z}$, 对任何 $m \in \mathbb{Z}$, $m+0=0+m=m$;
- 4) 对任何 $m \in \mathbb{Z}$, 有 $-m \in \mathbb{Z}$, 使 $(-m)+m=m+(-m)=0$.

例2 在全体 $n \times n$ 非异实矩阵集合

$$M_n = \{A = [a_{ij}] | a_{ij} \in \mathbb{R}, i, j = 1, 2, \dots, n; \det A \neq 0\}$$

中按矩阵乘法“ $\cdot$ ”, 有

1) 对任二矩阵 $A, B \in M_n$, 因 $A \cdot B$ 仍为 $n \times n$ 实矩阵且 $\det(A \cdot B) = \det A \cdot \det B \neq 0$, 故 $A \cdot B \in M_n$;

2) 对任何 $A, B, C \in M_n$, $(A \cdot B) \cdot C = A \cdot (B \cdot C)$;

3) n 阶单位矩阵 $E = \begin{bmatrix} 1 & & \\ & \ddots & \\ & & 1 \end{bmatrix} \in M_n$, 并且对任何 $A \in M_n$, $A \cdot E =$

$$E \cdot A = A;$$

4) 对任何 $A \in M_n$, 因 $\det A \neq 0$, 必有 $A^{-1} \in M_n$, 使 $A^{-1} \cdot A = A \cdot A^{-1} = E$.

例3 设有正三角形纸片. 开始时, 三个顶点 A, B, C 位于空间中三个固定点 1, 2, 3 上. Z, C'_1, C''_1, C'''_1 为空间中的固定轴, Z

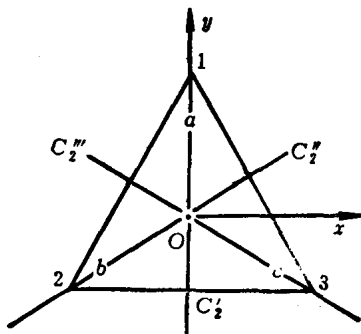


图 1-1

轴①通过三角形的中心 O 垂直纸面且指向纸外, C'_2 轴通过点1和 O , C''_2 轴和 C'''_2 轴分别通过2、 O 和3、 O . 现考察使三角形的位置与原来位置重合的下列动作:

c_3 : 绕 Z 轴沿逆时针方向转 120° ;

c_3^2 : 绕 Z 轴沿逆时针方向转 240° ;

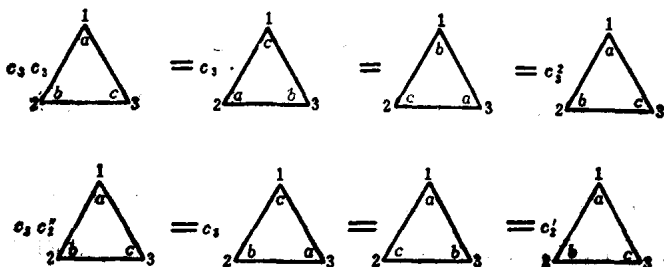
c'_2 : 绕 C'_2 轴转 180° ;

c''_2 : 绕 C''_2 轴转 180° ;

c'''_2 : 绕 C'''_2 轴转 180° ;

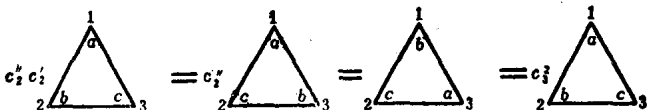
e : 不动或绕任一轴转 $k \cdot 360^\circ$, k 为任一整数.

记 $D_3 = \{e, c_3, c_3^2, c'_2, c''_2, c'''_2\}$, 再规定 D_3 中任二动作之“乘法”就是此二动作“相继进行”, 其结果动作叫做此二动作之乘积②, 譬如



可以验证:

1) D_3 中任二动作之乘积仍为 D_3 中之动作, 如上 $c_3 \cdot c_3 = c_3^2$ ③, $c_3 \cdot c'_2 = c'_2$; 再如



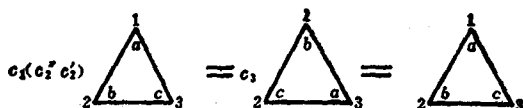
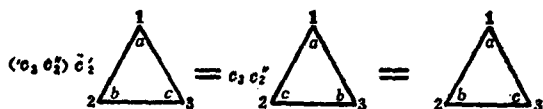
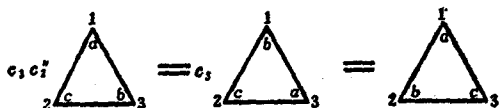
① 一般称为 Oz 轴, 本书中我们称为 Z 轴.

② 再强调一次, 1、2、3是空间中的固定点, Z 、 C'_2 、 C''_2 、 C'''_2 是固定轴, 不随三角形纸片的变动而变动.

③ 由此可见, c_3^2 的上角标“2”的确表示 c_3 的2次乘幂.

即 $c_2'' \cdot c_2' = c_3^2$.

2) 对 D_3 中的任意三个动作 a, b, c , $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$, 譬如

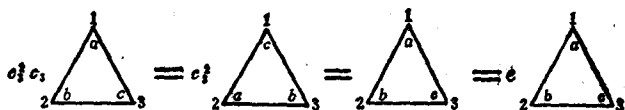
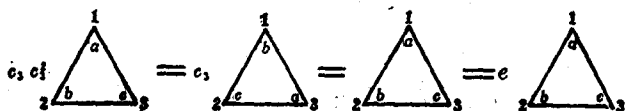


即 $(c_3 \cdot c_2'') \cdot c_2' = c_3 \cdot (c_2' \cdot c_2')$.

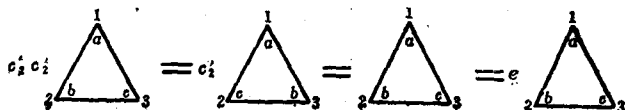
3) 对 D_3 中任一动作 a , $e \cdot a = a \cdot e = a$.

4) 对 D_3 中任一动作 a , 均有 $a^{-1} \in D_3$ 使 $a \cdot a^{-1} = a^{-1} \cdot a = e$.

譬如



即 $c_3^{-1} = c_3^2$, $(c_3^2)^{-1} = c_3$, $c_3 \cdot c_3^{-1} = c_3^{-1} \cdot c_3 = e$; 又如



$$\text{即 } c_2'^{-1} = c_2', c_2' \cdot c_2'^{-1} = c_2'^{-1} \cdot c_2' = e.$$

在上述三个例子中, 如果舍弃集合中元素的具体内容和运算的具体含义, 抽象地看, 它们共同的特点是: 有一个集合, 其元素间有一个运算且满足四个条件: ①封闭性; ②结合律; ③有单位元; ④有逆元素. 人们将具有了满足上述四个条件的运算的集合看成一个“系统”, 并称之为群. 数学、物理、化学以及其他科学技术中经常遇到这样的“系统”, 群论就是研究这样的“系统”及其应用的一个数学分支.

定义 设 G 是一个非空集合, 如果 G 中有一个运算“ $\cdot$ ”, 称为乘法, 满足下列条件时, 则称 G 为一个群①:

- 1) 封闭性: 对任意 $a, b \in G$, 有唯一的 $c \in G$, 使 $a \cdot b = c$;
- 2) 结合律: 对任意 $a, b, c \in G$, $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$;
- 3) 存在单位元素 $e \in G$, 对任意 $a \in G$, $e \cdot a = a \cdot e = a$;
- 4) 对任意元素 $a \in G$, 存在逆元素 $a^{-1} \in G$, 使

$$a^{-1} \cdot a = a \cdot a^{-1} = e.$$

如果群 G 中的乘法“ $\cdot$ ”还满足

- 5) 交换律: 对任意 $a, b \in G$, 有 $a \cdot b = b \cdot a$,

则称 G 为交换群或 Abel 群.

注意, 群的定义中的“乘法”并不一定是通常的乘法, 而只是“称为”乘法. 其实, 这个“乘法”的具体含义并不重要, 重要的是这种“乘法”满足定义中的四个条件. 譬如例 1 中的运算是通常的数的加法, 我们当然可以把它故意地称为“乘法”, 且将

$$1+2=3, 0+1=1, (-1)+1=0$$

等故意地写作

$$1 \cdot 2 = 3, 0 \cdot 1 = 1, (-1) \cdot 1 = 0,$$

① 准确地说, 应将系统 $\{G, \cdot\}$ 称为群.

又如例 2 中的运算是通常的矩阵乘法；例 3 中的运算是使正三角形纸片位置重合的运动的相继进行。但是，它们都满足群定义中的四个条件。所以，例 1 的 $\mathbb{Z}$ 、例 2 的 M_n 和例 3 的 D_3 都是群。习惯上称 $\mathbb{Z}$ 为整数加法群，称 M_n 为 n 阶非异实矩阵群。与 D_3 类似的群在物理与化学中经常遇到，群中的每一元素都是使某个物质体系所占空间位置（构成某个图形）与原来位置重合的动作，称这样的动作为对称操作，称这样的群为对称操作群。如果这个群包括了该物质体系的全部对称操作，则称这个群为该物质体系的对称操作群。

今后乘法运算符号“ $\cdot$ ”经常省略，如 $a \cdot b$ 写作 ab 。

因为数的加法满足交换律，故整数加法群 $\mathbb{Z}$ 是 Abel 群。但因矩阵乘法一般不可交换，如

$$\begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 2 & 1 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \neq \begin{bmatrix} 1 & 0 \\ 1 & 1 \end{bmatrix} \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 0 & 1 \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 1 \\ 1 & 2 \end{bmatrix}.$$

故而 n 阶非异实矩阵群 M_n 不是 Abel 群。又已知 $c_3 c_2^n = c_2'$ ，而

$$c_2' c_3 = c_2' = c_2 = c_2'$$

即 $c_3 c_2^n \neq c_2^n c_3$ ，所以 D_3 也不是 Abel 群。

元素个数有限的群称为有限群，否则称为无限群。有限群的元素个数称为群的阶。有限群 G 的阶记作 $|G|$ 。 D_3 是有限群， $|D_3| = 6$ ；整数加法群 $\mathbb{Z}$ 和 n 阶非异实矩阵群 M_n 都是无限群。

要认识一个群，重要的是弄清它的乘法运算，即群中任二元素的乘积是哪个元素？在有限群的情形可最原始的方法是将群中每一元素与其他元素逐个相乘，看看乘积是哪个元素并记录下来。

如下的记录群中元素乘积的表称为乘法表^①:

G	e	f	g	...
e	e	ef	eg	...
f	fe	ff	fg	...
g	ge	gf	gg	...
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

还有另一种形式的乘法表:

G	e	f	g	...
e	e	ef	eg	...
f^{-1}	$f^{-1}e$	e	$f^{-1}g$	...
g^{-1}	$g^{-1}e$	$g^{-1}f$	e	...
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$

它的特点是对角线上的元素都是单位元素 e .

下面是 D_3 群的乘法表, 可以像例 3 中推导 $c_3c_2''=c_2'$ 那样来构造这个表:

表 1-1 D_3 的乘法表

D_3	e	c_3	c_3^2	c_2'	c_2''	c_2'''
e	e	c_3	c_3^2	c_2'	c_2''	c_2'''
c_3	c_3	c_3^2	e	c_2'''	c_2'	c_2''
c_3^2	c_3^2	e	c_3	c_2''	c_2'''	c_2'
c_2'	c_2'	c_2''	c_2'''	e	c_3	c_3^2
c_2''	c_2''	c_2'''	c_2'	c_3^2	e	c_3
c_2'''	c_2'''	c_2'	c_2''	c_3	c_3^2	e

重排定理 在有限群的乘法表中, 每个群元素在每行中一定出现且仅出现一次, 在每列中也一定出现且仅出现一次.

证明 设 G 为 n 阶群, 乘法表有 n 行 n 列:

^① Cayley 在 1854 年最早使用了群的乘法表.

	e	g_2	$\cdots$	g_j	$\cdots$	g_k	$\cdots$	g_n
e	e	g_2	$\cdots$	g_j	$\cdots$	g_k	$\cdots$	g_n
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
g_i	g_i	$g_i g_2$	$\cdots$	$g_i g_j$	$\cdots$	$g_i g_k$	$\cdots$	$g_i g_n$
$\vdots$	$\vdots$	$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$		$\vdots$
g_n	g_n	$g_n g_2$	$\cdots$	$g_n g_j$	$\cdots$	$g_n g_k$	$\cdots$	$g_n g_n$

任取第 l 行, 它的元素由第 1 行元素左乘 g_l 而得:

$$g_l e = g_l \quad g_l g_2 \quad \cdots \quad g_l g_j \quad \cdots \quad g_l g_k \quad \cdots \quad g_l g_n.$$

因此, 若能证明其中任二元素均不相同, 则 G 的每一元素一定出现且仅出现一次. 为此, 采用反证法, 设有二元素相同: $g_i g_j = g_l g_k$, 左乘 g_i^{-1} 便得 $g_j = g_k$, 但 g_j 和 g_k 是 G 的不同元素, 矛盾.

关于列的结论也可同样证明. 证毕.

这个定理也可表述成, 有限群的乘法表中, 每行的元素是第一行元素的重新排列, 每列的元素是第一列元素的重新排列. 所以称为重排定理.

例 4 在空间中取定一坐标系 $OXYZ$, 记绕 Z 轴转 α 角的旋转为 $C^{(Z)}(\alpha)$. 我们约定, 与转轴正向成右手系的转角为正. 记 $R(2)$ 为绕 Z 轴的所有旋转组成的集合:

$$R(2) = \{C^{(Z)}(\alpha) \mid -\infty < \alpha < +\infty\},$$

并规定 $R(2)$ 中任意两个旋转的乘积 $C^{(Z)}(\alpha) \cdot C^{(Z)}(\beta)$ 为先进行转角为 β 的旋转 $C^{(Z)}(\beta)$, 再进行转角为 α 的旋转 $C^{(Z)}(\alpha)$ 的结果, 它仍为一个旋转. 也就是说, 对空间中任一向量 r ,

$$(C^{(Z)}(\alpha) \cdot C^{(Z)}(\beta))r = C^{(Z)}(\alpha)(C^{(Z)}(\beta)r).$$

容易看出:

- 1) $C^{(Z)}(\alpha) \cdot C^{(Z)}(\beta) = C^{(Z)}(\alpha + \beta) \in R(2);$
- 2) $(C^{(Z)}(\alpha) \cdot C^{(Z)}(\beta)) \cdot C^{(Z)}(\gamma) = C^{(Z)}(\alpha + \beta) \cdot C^{(Z)}(\gamma)$
 $= C^{(Z)}(\alpha + \beta + \gamma),$