群论及其在物理中的应用

马中骐　戴安英　编著

北京理工大学出版社

群论及其在物理中的应用

马中骐　戴安英　编著

北京理工大学出版社

内容简介

本书系统地阐述了物理学中的群论方法，在介绍有限群、李群及其线性表示一般理论的基础上，用群论方法透彻讲述了角动量理论，从群论角度详尽研究了晶体的晶系、布拉伐格子、晶格点群和空间群的性质，建立起以杨算符为中心的一套理论体系，系统讨论了置换群、SU(N)群和SO(N)群及其线性表示的性质，最后简要介绍了近年来在物理学中发展起来的Kac-Moody代数和Virasoro代数的主要数学基础。

本书从线性代数复习开始，自成体系和深入浅出地阐述了物理学中常用的群论方法，既不拘泥于冗长的数学论证，又避免陷入具体的物理细节，始终以群论本身理论为主线，大多数定理都给出了明证明，各章之后附有习题，便于读者理解和自学。本书是物理系高年级学生和研究生的教材，内容全面，可满足物理系不同专业的不同需要，对不同专业，教学内容可作适当删选。本书也可供大学高年级学生、教师和科研人员参考。

群论及其在物理中的应用

马中骐　戴安英　编著

*

北京理工大学出版社出版

新华书店北京发行所发行　各地新华书店经售

国防出版社印刷厂印刷

*

850×1168毫米　32开本　14印张　360千字

1988年12月第一版　1988年12月第一次印刷

ISBN 7-81013-063-3/O·11

印数：1-4000册　定价：3.50元

前　言

对称性在物理学中，特别是在物质微观运动规律的研究中，起着越来越重要的作用。群论是研究系统对称性质的重要数学工具，因此物理工作者迫切需要掌握系统的群论方法，许多高等院校已把群论列为物理系高年级学生的选修课和研究生的必修课。

作者自1962年以来，曾给物理系大学生和研究生多次讲授群论课和编写群论讲义，而且在科研中具体运用各种群论方法，积累了一定的经验和体会。在教学过程中深感需要一本适合物理系学生学习的群论教科书。这本书应该系统介绍群论的知识，但避免冗长的过于抽象的数学论证，应该尽可能根据物理应用的需要引入数学概念和定理，把抽象的数学理论化为具体的物理学中常用的群论方法，便于物理系学生接受。同时，这本书在介绍物理学中的各种群论方法时，应该避免过多地讨论物理背景和具体物理理论的细节，以免冲淡学生对群论方法本身的了解。作者基于这样的思想来尝试编写本书。

本书假定读者已具备量子力学和线性代数的基础知识，在此基础上本书尽可能自成体系地介绍物理学中常用的群论方法。在引言中，概括复习了物理工作者必备的线性代数知识，对一些容易引起混淆的概念和公式，着重进行对比，并强调其物理意义。第一章至第三章给出了群、李群及其表示的基本概念和理论。球对称是物理学中最常见的对称性，第四章通过对$SO(3)$群的系统研究，全面介绍了物理学中的角动量理论，而且展示了群论方法在物理学中应用的一般途径。$SO(3)$群是学习其他李群的一个具体模型。根据固体物理专业学生的需要，第五章从群论角度详

尽研究了32种晶格点群、七种晶系、14种布拉伐格子和73种简单空间群的性质，概括介绍了一般空间群的标记和晶格对称性与能带结构的关系，能带理论的进一步深入研究，将由固体理论的书籍来介绍。从第六章开始介绍理论物理专业需要的群论方法。由于杨算符方法在理论物理中得到了广泛的应用，第六章整理了一套以杨算符为中心的理论体系，并在第七章和第八章用这套杨算符方法研究$SU(N)$群和 $SO(N)$ 群的性质。第八章还讨论了洛伦兹群的性质。$SU(N)$和$SO(N)$群是物理中常用的两类李群。在此基础上，第九章讨论半单李代数的分类，导出所有可能的邓金图形式和素根表达式，读者因有具体李群作为模型，不致感到过分抽象。第十章概略介绍新近物理学中发展起来的Kac-Moody代数和Virasoro代数的一般知识。

就作者愿望而言，希望本书能帮助读者透过抽象的群论理论，掌握具体的群论方法，并能灵活应用。但限于篇幅，本书未能包括更多的例子，加之作者水平有限，恐难如愿。书中难免有错误和不妥之处，敬请读者予以指正。

作者感谢李卫教授仔细审阅了全部书稿，并提出宝贵的意见。

最后，作者衷心感谢胡宁教授与段一士教授在作者成长过程中给予的关怀和指导，以及对本书的关心和支持。

马中骐　戴安英

一九八八年于北京

目　录

引　　言

§0-1　群论和物理学

群论是研究系统对称性质的数学工具。十九世纪初，在研究高次代数方程能否根式求解的问题时，伽罗华（Galois）等人认识到，方程根的对称性是解决这问题的关键，从而引入了方程的所谓伽罗华群，得出的结论是，一般说来，五次和五次以上代数方程不能用根式求解。

1890年费得罗夫用群论方法解决了固体晶格理论的基本问题之一，即规则的空间点系分类问题，并确定了规则的空间点系总共有230种。

十九世纪末，数学家把群论方法应用于微分方程的研究，进而把群的概念从有限群扩充到无限群，建立了连续群的理论。二十世纪群论和拓扑学结合起来，形成了拓扑群理论，成为近代代数的重要分支之一。

量子理论建立以后，对称性的内容更丰富了，用对称性研究物理问题的要求也更迫切了。维格纳（Wigner）和韦尔(Weyl)等人运用群论方法研究量子系统的对称性质，可以不通过求解运动方程，得到系统许多普遍的精确的性质。群论在物理学中的广泛应用，推动了物理学和群论理论本身的迅速发展。

运用群论方法，研究系统的对称性质，引出系统的各种定量和定性的结论，有下面两个重要特点：（1）只要依据的对称性质是严格的，则由它引出的结论是精确的、可靠的；（2）对称性质与系统的具体细节无关，特别当我们对所研究对象还知之甚少的

情况下，分析系统的对称性质，就可以得出一些带普遍性的结论来，甚至可以以对称性质作为依据，猜测和探索系统的基本运动规律。

在量子理论中，运用群论方法，对系统的能级和波函数进行标志和分类，讨论在微扰的作用下能级的可能分裂，提供各种跃迁的选择定则。在粒子物理理论中，根据对称性对发现的大量粒子和共振态进行分类，探索各种基本相互作用的耦合形式及其统一。近年来，大范围量子场论和大范围群论紧密联系在一起向前发展。新近发展起来的Kac-Moody 代数和 Virasoro 代数正成为粒子物理和统计物理的重要研究课题和工具，齐头并进。最近，辫子群（Braid group）的研究取得进展，正吸引着数学家和物理学家的注意和兴趣。当今，群论已不单纯作为一种数学方法，它本身已成为量子理论和粒子物理的一个不可分割的组成部分。

§0-2　线性代数复习

群论的主要数学基础是线性代数。本节将紧密结合物理学，复习线性空间、矢量、矢量基、线性算符等概念，以及它们的联系和在变换中的各种性质，突出若干容易混淆的概念。

一、线性空间和矢量基

设哈密顿量$H(x)$的能级E是n度简并的，则能找到n个线性无关的本征函数$\psi_\mu(x)$

$$H(x)\psi_\mu(x)=E\psi_\mu(x),\quad \mu=1,\ 2,\cdots n \tag{0-1}$$

其中x代表系统所有自由度的坐标，$\psi_\mu(x)$称为函数基，或称矢量基。ψ_μ的任何线性组合

$$\phi(x)=\sum_{\mu=1}^{n} a_\mu\psi_\mu(x) \tag{0-2}$$

仍是$H(x)$的同一能级的本征函数，$\phi(x)$的集合构成n维函

数空间，或称线性空间，ϕ 称为该空间的矢量。该空间两矢量相加，对应分量相加，加法满足线性关系：

$$\phi_2(x)=\sum_{\mu=1}^{n} b_\mu\psi_\mu(x)$$

$$c_1\phi(x)+c_2\phi_2(x)=\sum_{\mu=1}^{n}(c_1a_\mu+c_2b_\mu)\psi_\mu(x) \tag{0-3}$$

把这些概念抽象出来，形成线性空间及其矢量的概念。在一定的函数基ψ_μ下，函数 ϕ 与一组有 n 个分量的有序数 $(a_1a_2\cdots a_n)$ 存在一一对应的关系，这一组有序数作为一个整体描写一个确定的物理内容，称为矢量，记作$\boldsymbol{a}$，有时用列矩阵 $\underline{a}$ 描写矢量：

$$\underline{a}=\begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} \tag{0-4}$$

每个数a_μ称为这矢量的分量。函数基对应矢量基$\boldsymbol{e}_\mu$，它只有一个分量不为零

$$(\boldsymbol{e}_\mu)_\nu=\delta_{\mu\nu} \tag{0-5}$$

任何矢量可以表为这组矢量基的线性组合，

$$\boldsymbol{a}=a_1\boldsymbol{e}_1+a_2\boldsymbol{e}_2+\cdots+a_n\boldsymbol{e}_n=\sum_{\mu=1}^{n} a_\mu\boldsymbol{e}_\mu \tag{0-6}$$

所有矢量的集合构成 n 维线性空间$\mathscr{L}$。在线性空间中，两矢量相等必须 n 个分量全部对应相等；两矢量相加，所有分量对应相加；数量和矢量相乘，该数量和矢量的所有分量分别相乘；所有分量为零的矢量称为零矢量。

如果存在m个不全为零的常数c_i，使m个矢量$\boldsymbol{a}^{(1)}$，$\boldsymbol{a}^{(2)}$，…，$\boldsymbol{a}^{(m)}$满足线性关系

$$c_1 a^{(1)}+c_2 a^{(2)}+\cdots+c_m a^{(m)}=\sum_{i=1}^{m} c_i a^{(i)}=0 \qquad (0\text{-}7)$$

则称此m个矢量线性相关。反之，如果不存在这样m个不全为零的常数c_i使（0-7）成立，则称此m个矢量线性无关。n维线性空间中，线性无关的矢量数目不能大于n。

m个线性无关的矢量的任一线性组合

$$c_1 a^{(1)}+c_2 a^{(2)}+\cdots+c_m a^{(m)} \qquad (0\text{-}8)$$

仍是n维线性空间的一个矢量，所有形如（0-8)的矢量的集合构成一个m维线性空间，称为线性空间$\mathscr{L}$的子空间$\mathscr{L}_1$，或称由m个矢量$a^{(i)}$生成的m维子空间。零空间和全空间是两个平庸的子空间，通常不计入子空间之列。

两个子空间$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$所有矢量和的集合称为两个子空间的和，记作$\mathscr{L}_1+\mathscr{L}_2$；同时属于两个子空间的矢量的集合称为两个子空间的交，记为$\mathscr{L}_1\cap\mathscr{L}_2$。

$\mathscr{L}$称为两子空间$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的直和的必充条件是下面等价的三条件之一成立。

（1）$\mathscr{L}=\mathscr{L}_1+\mathscr{L}_2$，且$\mathscr{L}_1\cap\mathscr{L}_2$是零空间。

（2）$\mathscr{L}=\mathscr{L}_1+\mathscr{L}_2$，且$\mathscr{L}$的维数等于$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的维数之和。

（3）$\mathscr{L}$中任一矢量可以唯一地分解为分属$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$的矢量之和。

直和记作$\mathscr{L}=\mathscr{L}_1\oplus\mathscr{L}_2$。直和的概念可以推广到多于两个子空间的情况，$\mathscr{L}$可以分解为若干个子空间的直和。若$\mathscr{L}_1\oplus\mathscr{L}_2=\mathscr{L}$，则$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$称为互补子空间。与$\mathscr{L}_1$互补的子空间不是唯一的。

二、线性变换和线性算符

量子力学中物理量用线性算符来描写，它作用在波函数上，将波函数按一定规律变成另一个波函数，这样的变换规律是线性的

$$L(x)[c_1\phi_1(x)+c_2\phi_2(x)]=c_1L(x)\phi_1(x)$$
$$+c_2L(x)\phi_2(x) \tag{0-9}$$

如果L与哈密顿量H对易

$$[H(x),\ L(x)]=0$$

则L作用在H的本征函数ψ_μ上，仍是H同一本征值的本征函数

$$H(x)[L(x)\psi_\mu(x)]=L(x)[H(x)\psi_\mu(x)]$$
$$=E[L(x)\psi_\mu(x)]$$

因此$L\psi_\mu$仍是由ψ_μ架设的n维函数空间中的一个矢量，可以表成ψ_μ的线性组合

$$L(x)\psi_\mu(x)=\sum_\nu \psi_\nu(x)R_{\nu\mu} \tag{0-10}$$

这样的线性空间$\mathscr{L}$称为对算符L不变的空间，而组合系数$R_{\nu\mu}$排列成$n\times n$矩阵，称为算符L在空间$\mathscr{L}$中关于基ψ_μ的矩阵形式，简称L的矩阵形式。L对$\mathscr{L}$中任何矢量ϕ的作用规律完全由矩阵R来描写

$$L(x)\phi(x)=L(x)\sum_{\mu=1}^{n}a_\mu\psi_\mu(x)=\sum_{\mu\nu}\psi_\nu(x)R_{\nu\mu}a_\mu$$

设
$$L(x)\phi(x)=\phi_1(x)=\sum_\nu \psi_\nu(x)b_\nu \tag{0-11}$$

则
$$b_\nu=\sum_\mu R_{\nu\mu}a_\mu \tag{0-12}$$

注意，矢量基的变换（0-10）是关于矩阵R前面指标求和，而矢量分量的变换（0-12）是关于矩阵R后面指标求和。

算符对函数空间矢量的作用可以推广到一般线性空间中去。线性算符L描写线性空间矢量的一种特定变换规律，这种规律满足线性关系

$$L[c_1\boldsymbol{a}+c_2\boldsymbol{b}]=c_1L\ \boldsymbol{a}+c_2L\ \boldsymbol{b} \tag{0-13}$$

若L作用在$\mathscr{L}$中任一矢量$\boldsymbol{a}$上得到仍属于$\mathscr{L}$的矢量$\boldsymbol{b}$

$$L\ \boldsymbol{a}=\boldsymbol{b}\in\mathscr{L} \tag{0-14}$$

则称此线性空间关于算符 L 是不变的。L 对不变空间 $\mathscr{L}$ 中的矢量和矢量基的作用可完全由相应矩阵 R 来描写

$$L\boldsymbol{e}_\mu = \sum_\nu \boldsymbol{e}_\nu R_{\nu\mu} \tag{0-15}$$

$$b_\mu = \sum_\nu R_{\mu\nu} a_\nu, \quad \underline{b} = R\ \underline{a} \tag{0-16}$$

R 称为 L 在线性空间 $\mathscr{L}$ 中关于基 $\boldsymbol{e}_\mu$ 的矩阵形式。矢量基只有一个分量不为零〔见式（0-5)〕，它的分量也满足一般矢量分量的变换规律（0-16)

$$(L\boldsymbol{e}_\mu)_\rho = \sum_\nu (\boldsymbol{e}_\nu)_\rho R_{\nu\mu} = R_{\rho\mu} = \sum_\lambda R_{\rho\lambda}(\boldsymbol{e}_\mu)_\lambda \tag{0-17}$$

若子空间 $\mathscr{L}_1$ 中的矢量经 L 作用后仍属子空间 $\mathscr{L}_1$，则 $\mathscr{L}_1$ 称为 $\mathscr{L}$ 中关于算符 L 的不变子空间。通常不计零空间和全空间这两个平庸的不变子空间。

三、相 似 变 换

在线性空间 $\mathscr{L}$ 中，对一定的矢量基，矢量和列矩阵有一一对应的关系，算符和矩阵有一一对应关系。列矩阵和 $n \times n$ 矩阵分别是矢量和算符在一定矢量基中的表现形式。

在一个线性空间中，矢量基的选择不是唯一的，任何 n 个线性无关的矢量都可以作为一组矢量基。矢量基的改变并不改变矢量和算符本身，但改变了它们的表现形式，即改变了对矢量和算符的描写方式。

设 $\boldsymbol{e}'_\mu$ 是 n 个线性无关的矢量，分量为 $S_{\cdot\mu}$，

$$\boldsymbol{e}'_\mu = \sum_\nu \boldsymbol{e}_\nu S_{\nu\mu} \tag{0-18}$$

$\boldsymbol{e}'_\mu$ 的线性无关性保证 S 矩阵是非奇矩阵

$$\det S \neq 0 \tag{0-19}$$

因此存在逆矩阵S^{-1}，

$$\boldsymbol{e}_\mu=\sum_\nu \boldsymbol{e}'_\nu(S^{-1})_{\nu\mu} \tag{0-20}$$

即取$\boldsymbol{e}'_\mu$为新矢量基，原矢量基$\boldsymbol{e}_\mu$在$\boldsymbol{e}'_\mu$基中的分量为$(S^{-1})_{\nu\mu}$。同一矢量$\boldsymbol{a}$在两矢量基中的分量之间的联系为

$$\boldsymbol{a}=\sum_\mu \boldsymbol{e}_\mu a_\mu=\sum_{\nu\mu} \boldsymbol{e}'_\nu(S^{-1})_{\nu\mu}a_\mu=\sum_\nu \boldsymbol{e}'_\nu a'_\nu$$

$$a'_\nu=\sum_\mu (S^{-1})_{\nu\mu}a_\mu,\quad \underline{a}'=S^{-1}\underline{a} \tag{0-21}$$

同一算符在两组基中的矩阵形式的联系是

$$L\boldsymbol{e}_\mu=\sum_\nu \boldsymbol{e}_\nu R_{\nu\mu}$$

$$L\boldsymbol{e}'_\mu=\sum_\nu \boldsymbol{e}'_\nu R'_{\nu\mu}=L\sum_\nu \boldsymbol{e}_\nu S_{\nu\mu}=\sum_{\rho\nu}\boldsymbol{e}_\rho R_{\rho\nu}S_{\nu\mu}$$

$$=\sum_\lambda \boldsymbol{e}'_\lambda \sum_{\rho\nu}(S^{-1})_{\lambda\rho}R_{\rho\nu}S_{\nu\mu}$$

$$R'=S^{-1}RS \tag{0-22}$$

R'与R的这一联系称为相似变换。设L作用在矢量$\boldsymbol{a}$上得矢量$\boldsymbol{b}$，在基$\boldsymbol{e}_\mu$中有$\underline{b}=R\ \underline{a}$，在基$\boldsymbol{e}'_\mu$中

$$\underline{b}'=S^{-1}\underline{b}=S^{-1}R\ \underline{a}=S^{-1}RS\ \underline{a}'=R'\ \underline{a}' \tag{0-23}$$

矢量基的改变并不改变算符对矢量的作用。

矢量基的变换也可看成算符S的作用

$$\boldsymbol{e}'_\mu=S\boldsymbol{e}_\mu \tag{0-24}$$

由式（0-22）可知，S在两组矢量基中的矩阵形式是相同的。

设子空间$\mathscr{L}_1$关于算符L是不变的，$\mathscr{L}_2$是它的互补子空间。取$\mathscr{L}_1$和$\mathscr{L}_2$中的基作为新的矢量基，把它们对应的列矩阵依序排列起来构成S矩阵，前m列属子空间$\mathscr{L}_1$，后$n-m$列属子空间$\mathscr{L}_2$，经S相似变换，矩阵R变成R'，R'是L在新矢量基中的矩阵形式。既然$\mathscr{L}_1$关于L不变，

$$Le'_\mu = \sum_{\nu=1}^{m} e'_\nu R'_{\nu\mu} \quad \mu = 1, \ 2, \ \cdots, \ m \tag{0-25}$$

即

$$R'_{\rho\mu} = 0 \qquad \mu \leqslant m, \ \ \rho > m \tag{0-26}$$

$$S^{-1}RS = R' = \begin{pmatrix} R^{(1)} & T \\ 0 & R^{(2)} \end{pmatrix} \tag{0-27}$$

这样的矩阵称为阶梯矩阵。进一步，如果$\mathscr{L}_2$也对L保持不变，则$T = 0$，

$$S^{-1}RS = R' = \begin{pmatrix} R^{(1)} & 0 \\ 0 & R^{(2)} \end{pmatrix} = R^{(1)} \oplus R^{(2)} \tag{0-28}$$

这样的R'矩阵称为〔m，（$n-m$）〕型的方块矩阵，简称方块矩阵。方块矩阵可表为两个子矩阵的直和。如果$\mathscr{L}$可以分解为若干个子空间的直和，每一个子空间都对L保持不变，则L对应的矩阵R可通过相似变换化为若干子矩阵的直和，即化为方块矩阵。

四、本征值和本征矢量

在量子力学中，物理量算符的本征值是在测量该物理量时可能测得的数值，它描写物理量算符的特征，与函数基的选择无关。

在线性代数中，若

$$L\,\boldsymbol{a} = \lambda\,\boldsymbol{a} \tag{0-29}$$

则λ称为L的本征值，$\boldsymbol{a}$称为相应的本征矢量。显然，本征矢量架设关于L不变的一维不变子空间。把（0-29）写成矩阵等式

$$\sum_\rho R_{\mu\rho} a_\rho = \lambda a_\mu \tag{0-30}$$

a_μ有非零解的条件是

$$\det(R - \lambda \mathbf{1}) = 0 \tag{0-31}$$

其中$\mathbf{1}$是单位矩阵，$\lambda\mathbf{1}$是常数矩阵，（0-31）称为本征值满足的

久期方程。久期方程在相似变换中保持不变，因此本征值与矢量基的选取无关。久期方程是关于λ的n次代数方程，有n个根，即n个本征值。n个本征值之和等于R的矩阵迹$\mathrm{Tr}R$，本征值之积等于R的行列式$\det R$。

把本征值代入（0-30）可解得相应本征矢量$\boldsymbol{a}$，对应不同本征值的本征矢量互相线性无关。但在本征值有重根时，不一定可以找到数目和本征值重数相同的线性无关的本征矢量。如果R矩阵存在n个线性无关的本征矢量，即$\mathscr{L}$分解为n个分别关于L不变的一维子空间的直和，取这些本征矢量为新的基，L的矩阵形式是对角化的。这提供了通过相似变换把矩阵R对角化的方法：找R的n个线性无关的本征列矢量$\underline{S}_{.\nu}$

$$R\underline{S}_{.\nu}=\lambda_\nu\underline{S}_{.\nu}; \qquad \sum_\rho R_{\mu\rho}S_{\rho\nu}=\lambda_\nu S_{\mu\nu} \tag{0-32}$$

S矩阵由这些本征矢量作为列排列而成，因此非奇，存在逆矩阵，即

$$S^{-1}RS=\Lambda,\quad \Lambda_{\mu\nu}=\lambda_\nu\delta_{\mu\nu} \tag{0-33}$$

五、矢量内积

量子力学中两波函数内积定义为

$$\langle\phi_1(x),\ \phi_2(x)\rangle=\int\phi_1(x)^*\phi_2(x)(\mathrm{d}\boldsymbol{x})$$

其中（dx）表示对连续坐标积分，对分立坐标求和。内积为零称两函数正交，函数与自身的内积称为函数模平方，模为一的函数称为规一化函数。如果函数基是正交规一的

$$\langle\psi_\mu(x),\ \psi_\nu(x)\rangle=\delta_{\mu\nu}$$

则
$$\langle\phi_1(x),\ \phi_2(x)\rangle=\sum_{\mu\nu}a_\mu^*b_\nu\langle\psi_\mu,\ \psi_\nu\rangle=\sum_\mu a_\mu^*b_\mu$$

其中a_μ和b_ν分别是ϕ_1和ϕ_2在函数基ψ_μ中的分量。在线性代数中，两矢量内积定义为