群论与分子对称性

誉文德
张德聪　编

华南工学院出版社

群论与分子对称性

謍文德　张德聪　编

华南工学院出版社

内 容 提 要

群论是学习量子化学、分子结构及晶体结构等学科的重要基础，也是研究物质微粒运动规律的一种有力工具。

本书采用深入浅出的处理方法，较多地使用直观模型，避免繁琐的数学推导，力图使抽象的对称性概念较易地为读者所掌握。

全书共分六章，每章有适量习题，便于读者学习。书末附有化学上重要对称群的特征标表。

本书可作为化学系研究生理论基础课的教材，也适用于从事高等无机、高等有机、晶体结构、量子化学、分子光谱等学科的科研人员参考。

责任编辑：赵 琪

群论与分子对称性

昝文德 张德聪 编

华南工学院出版社出版发行
广东省新华书店经销
广东韶关新华印刷厂印刷
开本850×1168 1/32 印张 8 字数 200千
1987年7月第一版 1987年7月第一次印刷
印数：0 001—2 000
统一书号13410·008 定价 平 装 1.60元
半精装 1.90元

前　言

群论是学习量子化学、分子结构及晶体结构等学科的重要基础。

首先，是因为分子的对称性，亦即原子周围环境的对称性，严格而精确地决定了分子可能具有的能级数目和类型。对称性的研究能给出关于结构的定性的结果。比如说，可以预言有多少能态，在它们之间可能发生哪些相互作用和跃迁；可以预言具有对称性分子的基频数目，振动基频在红外光谱和喇曼光谱中的活性以及各种键和键角对振动基频的贡献方式等等。

另一方面，考虑了分子的对称性以后可以大大地简化包括量子化学计算在内的工作量，使计算更为迅速和出色。例如，当我们用Hückel 分子轨道理论去计算三乙烯基甲游离基(trivinyl-methyl radical)时，如果考虑了分子对称性进行计算，我们就可以将一个七阶行列式方程的问题简化为只须求解容易得多的一个三阶行列式方程和两个二阶行列式方程的问题，并且只会导致一个三次方程和一个二次方程而不必求解七次方程。

R.B.Woodward和R.Hoffmann将轨道对称性概念应用到有机化学中，他们所发现的关于某些协同反应的非常简单而普遍的规律——Woodward-Hoffmann定则是近年来化学反应理论上的一个重大进展。

在物理化学中，群论的应用则是与对称性紧密联系起来的。我们可以用群论来帮助弄清由于研究对象中存在的对称性使体系必然具有什么性质。体系存在的直接看得出来的对称性是现象，由此必然会具有的性质是本质，沟通这一现象和本质的桥梁就是群论。利用群论这一数学工具，只要知道所研究的体系具有哪些对称性质，可以不进行与体系的其他具体细节有关的计算，就能得出它性质的许多结论，而这些结论只与体系的对称性质有关，与体系的其他特殊性无关，因此具有普遍的意义。

目　　录

第一章　群的基础……………………………………………… (1)

§1.1　群的定义……………………………………………… (1)

§1.2　置换群……………………………………………… (6)

§1.3　子群………………………………………………(11)

§1.4　类………………………………………………(14)

§1.5　同构和同态………………………………………(15)

§1.6　群的直接乘积……………………………………(18)

参考文献………………………………………………(19)

第二章　分子的对称性与对称操作群……………………(20)

§2.1　对称元素和对称操作……………………………(20)

§2.2　对称操作的乘积…………………………………(25)

§2.3　等价对称元素和等价原子，对称操作的类………(30)

§2.4　点群………………………………………………(35)

§2.5　分子对称性的系统分类法………………………(57)

参考文献………………………………………………(60)

第三章　群的表示………………………………………(61)

§3.1　几何变换的矩阵形式……………………………(61)

§3.2　群的表示…………………………………………(63)

§3.3　群的不可约表示…………………………………(69)

§3.4　基与群的表示……………………………………(73)

§3.5　特征标表…………………………………………(78)

§3.6　广义正交定理及其推论…………………………(85)

§3.7　原子轨道的变换矩阵……………………………(93)

§3.8　循环群的表示…………………………………… (103)

§3.9　特征标表的推导……………………………………………(106)
§3.10 直积表示的特征标……………………………………………(111)
参考文献………………………………………………………………(117)
第四章　群论和量子化学……………………………………………(118)
§4.1　波函数作为不可约表示的基……………………………………(118)
§4.2　用分子所属对称性点群来标记分子轨道…………………………(121)
§4.3　积分非零的条件……………………………………………(128)
§4.4　选择定则……………………………………………………(131)
§4.5　对称性匹配函数……………………………………………(137)
§4.6　久期行列式的简化……………………………………………(148)
§4.7　杂化轨道……………………………………………………(152)
参考文献………………………………………………………………(168)
第五章　群论在配位场理论中的应用……………………………(169)
§5.1　引言…………………………………………………………(169)
§5.2　在化学环境中能级和谱项的分裂…………………………………(169)
§5.3　八面体络合物的分子轨道………………………………………(180)
§5.4　$[PtCl_4]^{2-}$的分子轨道能级图………………………………(191)
§5.5　络合物分子中的能级图…………………………………………(198)
参考文献………………………………………………………………(208)
第六章　分子振动…………………………………………………(209)
§6.1　多原子分子中的振动数目………………………………………(209)
§6.2　正则振动的对称类型……………………………………………(211)
§6.3　红外和喇曼光谱中的选择定则……………………………………(223)
§6.4　实例…………………………………………………………(227)
参考文献………………………………………………………………(232)
附录…………………………………………………………………(233)

第一章 群的基础

§1.1 群的定义

群的定义：按照一定的二元运算来组合并能满足下列各点要求的集合G称为群。这个二元运算一般称为乘。集合G的元素可以是数，代数符号或任何物理运动。

1．集合G中任何两个(相同的或不同的)元素相乘，其结果必定仍是G中的一个元素。这点规定了群具有封闭性。

2．这个运算符合分配律：$A(BC)=(AB)C$。书写时从左到右，执行运算时从右到左。注意此运算不一定符合交换律。

3．G中要有一个恒等元素E存在。对于任一元素A，有$EA=AE=A$。E在G中是唯一的，一般用E或e代表它。

4．任何元素都有一个逆元素，这个逆元素也在G中。若$AB=BA=E$成立，则称B为A的逆元，A为B的逆元。记作$A^{-1}=B$，或$B^{-1}=A$。

例1 除零外的全体实数按数学乘法运算构成一个群。在这里恒等元素是1，任一元素的逆元素是它的倒数。这是一个无限群。同理，全体非零复数对于数的乘法作成一个群。全体正实数对于数的乘法作成一个群。

例2 所有n维空间R_n中的向量$\mathbf{X}=(x_1,x_2,\cdots,x_n)$集合对于向量的加法作成一个群。在这里，$R_n$中所有向量就是群的元素，而群$R_n$中的乘法就是向量的加法。在这个群中零向量$\mathbf{O}=(0,0,\cdots,0)$就是它的恒等元素。向量$\boldsymbol{a}=(a_1,a_2,\cdots,a_n)$的逆元是$\mathbf{a}$的负向量$-\boldsymbol{a}=(-a_1,-a_2,\cdots,-a_n)$。

例3 全体n级非异方阵的集合M对于矩阵乘法作成一个群，

称为n维完全线性群。

事实上，M有下列的性质：

1．封闭性：如果A,B是M中任意两个方阵，则乘积AB也是M中的方阵．2．结合律：在M中乘法结合律成立．换句话说，对于M中的三个任意方阵A，B，C，常有$A(BC)=(AB)C$。3．恒等元：M中有n级单位方阵存在，它对于任意方阵A适合$EA=AE=A$。

$$E=\begin{pmatrix} 1 & & & 0 \\ & 1 & & \\ & & \ddots & \\ 0 & & & 1 \end{pmatrix}$$

4．逆元：对于M中每一个方阵A，它的逆方阵A^{-1}是M中的方阵，且适合$AA^{-1}=A^{-1}A=E$。

结果群G的元素的个数有限，则G称为有限群，否则G称为无限群．有限群的元素个数称为它的阶(阶的惯用符号为h)。

对于一个有限集合G和G中的乘法我们常用一个表来说明，这个表称为乘法表．为了作乘法表，我们先画一条垂线垂直于横线，把G的元素写在垂线的左边和横线的上面，再把两个元素的乘积写在行与列的交线上．运算的次序为先横线上的元素后垂线上的元素．

重排定理：设G为一有限群，它的元素是

$$a_1=e,\ a_2,\ a_3,\ \cdots,\ a_n \tag{1}$$

如果a_k是群G的任意元素，则G的每一个元素在序列

$$ea_k=a_k,\ a_2a_k,\ a_3a_k,\ \cdots,\ a_na_k \tag{2}$$

中必出现一次且只出现一次。

同样，G的每一个元素在序列$a_ke=a_k$，a_ka_2，$a_ka_3\cdots,a_na_k$中出现一次且只出现一次。

证明：设X为G中的任意一个元素，则可令$Xa_k^{-1}=a_r$，从而$a_ra_k=X$，于是元素X出现在序列(1)中．另一方面，X在序列

(1)中不能出现两次，这是因为由$a_r a_k = X$和$a_s a_k = X$将导出$a_r = a_s$。此定理的第二论断可同理证明。

此定理指明：在群的乘法表中，每一个元素在每一行和每一列中必出现一次且只出现一次。因此，每一行和每一列都是群的全体元素的一个重新排列。

关于逆元素，有一个法则：

两个或多个元素乘积的逆元素，等于各逆元素按相反次序的乘积，亦即：

$$(ABCD\cdots XY)^{-1} = Y^{-1}X^{-1}\cdots C^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

证明：为了简单起见，我们用一个三重积来证明这个法则。显然它是普遍正确的。若A，B，C是群的元素，它们的乘积D必定也是一个群元素，即

$$ABC = D$$

若现在用$C^{-1}B^{-1}A^{-1}$右乘这一等式的每一边，得

$$ABCC^{-1}B^{-1}A^{-1} = DC^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

$$ABEB^{-1}A^{-1} = DC^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

$$\vdots$$

$$\vdots$$

$$E = DC^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

因为D乘$C^{-1}B^{-1}A^{-1}$等于E，$C^{-1}B^{-1}A^{-1}$是D的逆元素，D又等于ABC，所以我们得到

$$D^{-1} = (ABC)^{-1} = C^{-1}B^{-1}A^{-1}$$

这就证明了上述法则。

如果对群G中的任意两元素a、b常有

$$ab = ba$$

则称G为交换群或阿贝尔群。

设a为群G的一个元素，我们可以作a与它自己的乘积aa，并把积记为a^2，同理，我们定义

$$a^n = \underbrace{aa\cdots a}_{n\text{个}}$$

称为a的n次方。如果再定义

$$a^0 = e，\ a^{-n} = (a^{-1})^n \qquad (n>0)$$

那么对于任何整数m，n下式成立：

$$a^m a^n = a^{m+n}$$

能使$a^n = e$成立的最小正整数n称为a的周期或a的阶。如果这样的一个n不存在，则称a的周期是无限。

如果群G的每一个元素都是G的某一个固定元素 a 的幂a^k（k是整数），则G为循环群，或者说，G是由元素a生成的，记作：

$$G = (a)$$

a就称为群G的一个生成元。a的周期就是循环群的阶。

例4 设n为一固定的正整数，则XY平面上绕坐标原点作角度 0，$\frac{2\pi}{n}$，$\frac{4\pi}{n}$，…，$\frac{2(n-1)\pi}{n}$旋的转变换

$$\begin{cases} x' = \cos\alpha_k - \sin\alpha_k \\ y' = \sin\alpha_k + \cos\alpha_k \end{cases} \qquad \text{其中}\alpha_k = \frac{2k\pi}{n} \quad (k=0，1，2，\cdots，n-1)$$

作成一个n阶的有限循环群。

事实上，上述变换的矩阵是

$$Z_k = \begin{pmatrix} \cos\alpha_k & -\sin\alpha_k \\ \sin\alpha_k & \cos\alpha_k \end{pmatrix}, \qquad (k=0，1，2，\cdots，n-1)$$

从而$Z_k Z_l = Z_{k+l}$；其中$k+l$如果大于$n-1$，设$k+l=n+s$，而$0\leqslant s\leqslant n-1$，则$Z_{k+l}=Z_s$，因而$Z_{k+l}$属于$Z_k$。因此这$n$个变换（或它们的矩阵）作成一个有限群$C_n$，它的恒等元是恒等变换，由于$Z_k Z_l = Z_{k+l}$，故有 $Z_k = Z_1^k$ ，所以C_n的元素都是

$$Z_1 = \begin{pmatrix} \cos\frac{2\pi}{n} & -\sin\frac{2\pi}{n} \\ \sin\frac{2\pi}{n} & \cos\frac{2\pi}{n} \end{pmatrix}$$的整数幂，

因此C_n是阶为n的有限循环群。

从同构对应的意义上说，例 2 和例 4 概括了所有的循环群。

下表列出了群为不同的阶时所含的群的数目。

表1-1

群的阶	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11	12	13
同构的群的数目	1	1	1	2	1	2	1	5	2	2	1	5	1
阿贝尔群的数目	1	1	1	2	1	1	1	3	2	1	1	2	1

习　　题

1. 举例说明一阶群、二阶群、三阶群和四阶群等.
2. G是由a、b、c三个元素所作成的集合，它们的乘法表是

$$\begin{array}{c|ccc} & a & b & c \\ \hline a & a & b & c \\ b & b & c & a \\ c & c & a & b \end{array}$$

判别G是否成群？

3. 证明下列四个方阵A，B，C，D对于矩阵的乘法作成一个群V：

$$A=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix}1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix},\quad C=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & 1\end{pmatrix},\quad D=\begin{pmatrix}-1 & 0\\ 0 & -1\end{pmatrix}$$

写出V的乘法表．V是否循环群？V是否交换群？

§1.2 置换群

置换改变一组数字的排列次序。例如，数字1，2，3可排列成：

$\underline{1\ 2\ 3}$，$\underline{1\ 3\ 2}$，$\underline{2\ 1\ 3}$，$\underline{2\ 3\ 1}$，$\underline{3\ 1\ 2}$或$\underline{3\ 2\ 1}$

置换使其次序改变，例如，置换数字1和3可以将$\underline{2\ 1\ 3}$改变成$\underline{2\ 3\ 1}$，引入一个记号(13)来表示1和3的置换操作，我们可写成：

$$(13)\quad \underline{2\ 1\ 3}=\underline{2\ 3\ 1}$$

如果要将$\underline{3\ 2\ 1}$改变成$\underline{1\ 3\ 2}$，数字1由2代替，2不是由1代替，而是由3代替，而3为1代替，我们定义这种置换为（1 2 3），于是

$$(1\ 2\ 3)\underline{3\ 2\ 1}=\underline{1\ 3\ 2}$$

其他可能发生的数字1，2，3的置换为(12)，(23)及(13)，我们称之为对换，而(123)和(132)称为轮换。如果我们置换多于三个的数字，可以写长一些的循环。

我们规定：

$(12)\equiv(21)$，$(23)\equiv(32)$，$(13)\equiv(31)$

$(123)\equiv(231)\equiv(312)$，$(132)\equiv(321)\equiv(213)$

若取n个整数1，2，…，n。由这n个数可以得出$n!$个排列。取这些排列中的一个

$$i_1,\ i_2,\ \cdots,\ i_n$$

从原有的排列1，2，…，n变为新排列i_1，i_2，…，i_n是通过把1换成i_1，2换成i_2，…，n换成i_n而得到的，我们把这个变换记作

$$P=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

并称之为n次置换.

一个n次置换的写法不一定要把上一行的数按自然顺序书写。我们可以将置换P的上一行写成这几个整数的任意一个排列，但是这时下面的数字也要作相应的变动，使数字k的下面仍是i_k。例如上述例子中的三次置换可写成：

$$\begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}132\\213\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}231\\312\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}213\\321\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}312\\123\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}321\\132\end{pmatrix}$$

于是有：

$$(12)\equiv\begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix},\quad(23)=\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix},\quad(13)=\begin{pmatrix}123\\321\end{pmatrix},\quad(123)\equiv\begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix},\quad(132)\equiv\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix}.$$

现在引入置换的乘法. 设P_1和P_2是任意n次置换，置换的乘积P_2P_1是指先施行P_1，再施行P_2所得的结果. 例如，三次置换

$$P_1=\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix},\quad P_2=\begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix},$$

那么$$P_2P_1=\begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}132\\213\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix}.$$

(注意，施行置换的次序是先右后左)

例1 按置换的乘法，我们有

$$\begin{tikzcd}
\underline{123} \arrow[r, "(23)"] \arrow[rr, bend right, "(13)"'] & \underline{132} \arrow[r, "(132)"] & \underline{321}
\end{tikzcd}$$

这表明，对一个数字的排列连续地施行(23)然后施行(132)等于单独地施行一个(13)，亦即：

$$(132)(23)\underline{123}=(13)\underline{123}$$

例2　乘积(23)(132)可写成：

$$(23)(132)=\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}312\\213\end{pmatrix}\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix}123\\312\\213\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix}=(12)$$

在这里，一个三层的括号表示进行了置换(23)(132)的相乘，即连续地施行了两个置换(23)(132)之后，结果是1被3所代替，然后3又被2所代替；2变为1，再变为1；3变为2，再变为3．同理可得

$$(123)(123)=(132)$$

$$(12)(23)=(123)$$

$$(13)(23)=(132)$$

从后面两式可见轮换可以写成两个对换的乘积．容易证明，任何n个符号的循环都可以表成$(n-1)$个对换的乘积，即：

$$(12\cdots r)=(12)(23)\cdots(r-2,\ r-1)(r-1,\ r)$$

如果把一个置换表示成对换的连乘积时数目为奇(偶)数，就说这一置换是奇(偶)置换．

可以证明，所有n次置换作成的集合S_n对上述定义的乘法作成一个群．

证明：1.封闭性．从S_n中任意取两个置换：

$$P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n\end{pmatrix},\quad P_2=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ j_1 & j_2 & \cdots & j_n\end{pmatrix}$$

因为P_2可以写成下列形式：

$$P_2=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & \cdots & i_n\\ k_1 & k_2 & \cdots & k_n\end{pmatrix},$$

所以

$$P_2P_1=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ j_1 & j_2 & \cdots & j_n\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} i_1 i_2 \cdots i_n \\ k_1 k_2 \cdots k_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ k_1 & k_2 & \cdots & k_n \end{pmatrix}$$

这就是说，乘积P_2P_1是一个n次置换，从而属于集合S_n。

2. 结合律

设

$$P_1=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n \end{pmatrix},\ P_2=\begin{pmatrix} i_1 i_2 \cdots i_n \\ j_1 j_2 \cdots j_n \end{pmatrix},$$

$$P_3=\begin{pmatrix} j_1 j_2 \cdots j_n \\ k_1 k_2 \cdots k_n \end{pmatrix},$$

则
$$(P_3P_2)P_1=\begin{pmatrix} i_1 i_2 \cdots i_n \\ k_1 k_2 \cdots k_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 2 \cdots n \\ i_1 i_2 \cdots i_n \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ k_1 & k_2 & \cdots & k_n \end{pmatrix}.$$

$$P_3(P_2P_1)=\begin{pmatrix} j_1 j_2 \cdots j_n \\ k_1 k_2 \cdots k_n \end{pmatrix}\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ j_1 & j_2 & \cdots & j_n \end{pmatrix}$$

$$=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ k_1 & k_2 & \cdots & k_n \end{pmatrix}$$

所以 $(P_3P_2)P_1=P_3(P_2P_1)$

这就是说，S_n的乘法适合结合律。

3. 恒等元

置换 $E=\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots & n \\ 1 & 2 & \cdots & n \end{pmatrix}$显然适合

$$EP=PE=P \quad (P\text{为}S_n\text{中的任意置换})$$

所以E就是S_n的恒等元，称为恒等置换，它亦写作(1)(2)…(n)。

4. 逆元

S_n中任意的置换

$P=\begin{pmatrix}1 & 2 & \cdots & n\\ i_1 & i_2 & \cdots & i_n\end{pmatrix}$有唯一的置换 $P^{-1}=\begin{pmatrix}i_1 & i_2 & \cdots & i_n\\ 1 & 2 & \cdots & n\end{pmatrix}$，它适合条件$P^{-1}P=PP^{-1}=E$。这里$E$代表恒等置换。

这样，就证明了S_n是一个群。这个群称为n次对称（置换）群。

例3 三次对称群S_3是一个阶为 6 的非交换群。S_3的六个元素是

$$E=\begin{pmatrix}123\\123\end{pmatrix},\quad A=\begin{pmatrix}123\\132\end{pmatrix},\quad B=\begin{pmatrix}123\\321\end{pmatrix},$$

$$C=\begin{pmatrix}123\\213\end{pmatrix},\quad D=\begin{pmatrix}123\\231\end{pmatrix},\quad F=\begin{pmatrix}123\\312\end{pmatrix}.$$

它们的轮换表示为：

$E=(1)(2)(3)$，$A=(23)$，$B=(13)$，

$C=(12)$，$D=(123)$，$F=(132)$。

其乘法表为：

	E	(12)	(23)	(13)	(123)	(132)
E	E	(12)	(23)	(13)	(123)	(132)
(12)	(12)	E	(123)	(132)	(23)	(13)
(23)	(23)	(132)	E	(123)	(13)	(12)
(13)	(13)	(123)	(132)	E	(12)	(23)
(123)	(123)	(13)	(12)	(23)	(132)	E
(132)	(132)	(23)	(13)	(12)	E	(123)

例4 S_3的三个元素组成的集合$\{E, (123), (132)\}$构成一个群，其乘法表为：

	E	(123)	(132)
E	E	(123)	(132)
(123)	(123)	(132)	E
(132)	(132)	E	(123)

§1.3 子 群

如果群G的子集H对于G的乘法也作成一个群，则H称为G的子群。也就是说，如果H的运算完全遵照G的运算，H本身又符合群的定义，H完全在G中，则H是G的子群。

例1 任何群G至少有两个子群，一个是群G自己，另一个是只有恒等元E一个元素作成的单阶群。这两个子群称为G的平凡子群，又称非真子群。

例2 在整数加群Z中，整数n的一切倍数所构成的集合对于数的加法显然构成一个群，因此它是Z的子群。

例3 由几个物体的置换群S_n是$n!$阶群，其中使某一个物体i不动的置换的集合构成$(n-1)!$阶群S_{n-1}。显然S_{n-1}是S_n的子群，因为S_{n-1}与S_n乘法关系相同，S_{n-1}本身是一个群，而它的所有元素包括在S_n之中。同理可知S_{n-2}是S_{n-1}的子群。

例4 上节中由S_3三个元素$\{E, (123), (132)\}$所组成的群是三次对称群S_3的子群。

g阶群的任意子群，它的阶h必为g的除数。换句话说，$g/h=m$，m是某个整数。也就是说，子群H的阶一定是G的阶的因子。现在让我们来证明此定理。

证明： 若子群H中包含E、H_2、H_3、…、H_h它包括E在内共有h个元素，即H的阶是h，G含有g个元素它的阶为g，且$g>h$；取G中任意一个不在H中的元素a，并左乘所有h个元素，得出下列的乘积：aE，aH_2，aH_3，…，aH_h。这里得到的结果不是一个群，(因为它不含E)我们称此集合为子群H的左陪集。