广义波谱学中的群论

林乔源 著

地震出版社

林喬源著

廣義波譜學中的群論

李國平署簽

地震出版社

(京)新登字 095 号

内 容 简 介

本书内容原是作者给波谱与原子分子等专业研究生讲授群论课程的讲稿,现经删节修改,以其通俗简明的内容与方法,阐述群论及其在广义波谱学中的应用,并备有大量习题。本书的特点是内容通俗、概念清晰、应用性强、容易入门。它是广义波谱学这一研究领域的一本群论新书。目的是为了给更多的读者作为自学之用,以便提高对广义波谱学的研究水平。当然,本书仍可作为有关专业的研究生的群论教材或参考书;也可作为高等学校有关专业师生的参考书。

广义波谱学中的群论

林乔源 著

责任编辑:杨懋源

地震出版社 出版发行

北京民族学院南路 9 号

武汉汉理印刷厂印刷

850×1168 1/32 6.75 印张 181 千字

1992 年 10月第一版 1992 年 10月第一次印刷

印数 001－100

(精) ISBN 7－5028－0760－8/O. 15

(1153) 定价 :18.80 元

* * *

印数 001－400

(平) ISBN 7－5028－0761－6/O. 16

(1154) 定价 :16.80 元

谨以此书献给我的朋友们!

作　者

1990年于武汉

前　　言

本书所称广义波谱学，是指频率从高频一直到红外、Raman光谱的广泛范围内物质之间的相互作用的研究。数学家们历来对抽象群理论更有兴趣，而物理学家们则对群的表示论的应用感兴趣。在近代物理学中，已引用了大量的群论结果。当然，群论也不是万能的工具，它也有自身的局限性。

本书系统地叙述了广义波谱学这一研究领域中的群论知识；并将群论在这一研究领域中的物理意义给予了解释与说明；同时，对群论应用于这一领域的研究，做了初步的尝试。它是一本对于广义波谱学工作者以及波谱与原子分子物理等专业的大学生、研究生、教师等较为实用的群论书籍。

鉴于上述，本书的目的在于把群论及其表示论应用于广义波谱学的研究，将广义波谱学的研究推向新的阶段。

让群论工作者与广义波谱学工作者，携手合作，共同完成这一历史使命。

林乔源

1990年于武汉

目　　录

引　言

群的概念始于19世纪初叶，群论的早期发展归功于高斯、柯西、阿贝尔等人。1925年，量子力学出现以后，群论才开始应用于物理学。目前，群论已广泛地应用于物理、化学以及其他研究领域。群论在广义波谱学的研究中，也正逐步起着它应有的作用。

本书所称广义波谱学，是指频率从高频一直到红外、Raman光谱的广泛范围内物质之间的相互作用的研究。数学家们历来对抽象群理论更有兴趣，而物理学家们则对群的表示论的应用感兴趣。在近代物理学中，引用了大量的群论结果。应用群论的方法，可使物理问题的处理，更为简捷、更能揭示物理现象的内在对称性。

由于群论中所用的术语、定义等等，使初学者抓不住要领；又由于群论是由数学家们独立创造的；因此群论对物理学家来说，是一种“泊来品”，学起来困难、用起来不顺手。能不能使群论通俗化、易于为物理、化学与其他工作者所掌握？这是一个十分重要的问题。本书的目的，便是企图使广义波谱学中所用到的群论通俗化，使广义波谱学工作者能够更快更好地掌握群论这一有力的工具，使广义波谱学的研究达到一个新的更高的水平。

§1 抽象群理论(群的基本知识)

什么叫做群？先看下面几个例子：

例 1 一切整数的集合S, 对加法“+”讲, 有:

i) a, b 为整数, $a, b \in S$, 引伸出$a+b \in S$.

ii) $(a+b)+c=a+(b+c)$.

iii) 存在 $0 \in S$, 有任意 $a \in S$, 使得 $0+a=a=a+0$。

iv) 任意 $a \in S$, 存在 $-a \in S$, 有性质 $a+(-a)=(-a)+a=0$.

满足上述四条, 称集合 S 对加法“+”成群。

例 2 一切正实数之集合R, 对于乘法“×”, 有

i) $a, b \in R$, 有$ab \in R$。

ii) $(ab)c=a(bc)$。

iii) 存在 $1 \in R$, 有任意 $a \in R$ 时, 使得 $1a=a1=a$

iv) 任意 $a \in R$, 存在 $a^{-1} \in R$, 有性质 $aa^{-1}=a^{-1}a=1$。

满足上述四条, 称集合 R对乘法“×”成群。

例 3 一切非奇异n 阶矩阵之集合 m, 对乘法“×”, 有:

i) $A, B \in m$ 有$AB \in m$。

ii) $A, B, C \in m$, 有$(AB)C=A(BC)$。

iii) 存在单位矩阵 $I \in m$, 有任意 $A \in m$, 使得 $IA=AI=A$.

iv) 任意$A \in m$, 有$A^{-1} \in m$, 且 $AA^{-1}=A^{-1}A=I$。

满足上述四条, 称集合 m 对乘法“×”成群。

总结上述三例, 抽象统一为:

集合 G, 运算方法“·”, 有:

i) $a, b \in G$, $a \cdot b \in G$.

ii) $(a \cdot b) \cdot c = a \cdot (b \cdot c)$

iii) $\exists\, e \in G$，使得$\forall x \in G$，恒有 $e \cdot x = x \cdot e = x$

iv) $\forall\, a \in G$，$\exists f_a \in G$，f_a为 a的函数，使得 $a \cdot f_a = f_a \cdot a = e$.

若集合G满足上述四个条件，则称 G 关于运算“·”成群。

除了满足上述四个条件之外，群中每两个元素若还能交换，即满足 $ab = ba$；a，$b \in G$，则这群称为阿贝尔群。

群只研究“共性”，不研究“个性”。

下面考虑在平面上所有的向量。所有向量的集合 G，向量的加法作为运算方法，满足群的第一、第二条件；e 为0 向量时，满足群的第三条件；因正向量加一个大小相同的反方向的（负）向量为0向量，于是又满足群的第四条件；故所有向量的集合 G 成群。

再举一例，一物体的位移，一切位移的集合 G，运算方法为先后次序，见图 1.1，显然，满足群的第一、第二条件；当e为不动的

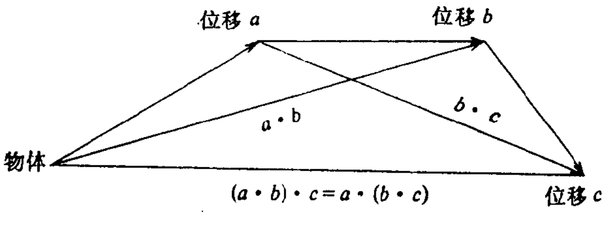


图 1.1　物体的位移

位移（即 0 位移）时，满足第三条件（先移a，后不动，写成$a \cdot 0$；先不动，后移a，写成$0 \cdot a$；于是有$a \cdot 0 = 0 \cdot a = a$）；搬出去，又搬回来（搬回来是搬出去的逆），等于不动（即0 位移），有：搬出去·搬回来＝搬回来·搬出去＝不动的位移，满足第四条件；故一切位移的集合 G，对运算方法为先后次序成群。

16世纪笛卡尔的坐标系使几何的研究应用了代数方法，使几何与代数二者联系起来。例如三度空间中，有

$$\cos\varphi = \frac{a_1b_1 + a_2b_2 + a_3b_3}{\sqrt{a_1^2 + a_2^2 + a_3^2}\ \sqrt{b_1^2 + b_2^2 + b_3^2}},$$

等式左边是几何，右边是代数。近年来，为了研究峰形(如对海岸线、山峰等的描述)，提出了分数维，例如 1.76 维，1.56 维等等；以前数学家用分数维，现在物理学家也用它了。若推广到三维复数空间，例如 $\vec{a} = \{-i, 1, 3i\}$，而仍用实数空间的长度公式，便得出 $\|\vec{a}\| = 3i$，这样得出虚数的结果，不合理，它违反三维空间的客观事实；三维空间的长度应该是实数，且是正数。因此必须引入共轭。

若将向量写成矩阵形式，如

$$\vec{a} = \begin{pmatrix} a_1 \\ a_2 \\ \vdots \\ a_n \end{pmatrix} = (a_1, a_2, \cdots\cdots a_n)^T;$$

而当矩阵 $A = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$，有 $A^T = \begin{pmatrix} 1 & 2 \\ 2 & 4 \end{pmatrix}$，即 $A = A^T$ 时，称 A 为对称矩阵，下面我们引入对称操作群。

如固定正方形中心 O 点，正方形转 45°，则不能称为对称操作。一个物体，转动前后，任意占有空间的同一位置，且二点之间的距离不变，则数学上称为对物体的对称操作。上述正方形关于通过 O 点的轴转 90°，便为对称操作。可见，对称操作包含：

i) 整个物体仍占同一空间位置；

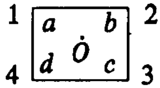
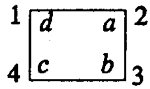
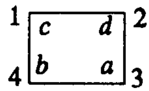
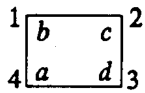
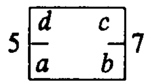
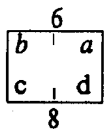
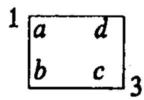
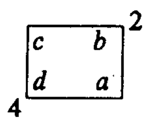
ii) 物体中的每一个点的相对位置不变，绝对位置可以变；

iii) 物体中任意二点之间的距离在转动前后不变。

对于上述平面正方形，有四个对称操作：90°，180°，270°，360°；全部对称操作集合构成群。

下面我们叙述正方形的对称性群。我们知道，正方形的对称变换，可描写成表 1.1。

表 1.1

符号	操作	结果
E	恒等操作	
C_4	绕垂直于正方形并通过 O 的轴线，沿顺时针方向转 90°（$2\pi/4=90°$）	
C_4^2	绕上述轴线转 180°（$2\pi\times2/4=180°$）	
C_4^3	绕同一轴线，转 270°（$2\pi\times3/4=270°$）	
m_x	对直线5－7的反射	
m_y	对直线 6－8 的反射	
σ_u	对直线 1－3 的反射	
σ_v	对直线 2－4 的反射	

上表1.1 中 8 个变换构成一个群，称正方形对称性群。所有这些群元素之积，可用一个表 1.2 描述，此表 1.2 称群乘法表。

表 1.2

第二操作	第一操作							
	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
E	E	C_4	C_4^2	C_4^3	m_x	m_y	σ_u	σ_v
C_4^3	C_4^3	E	C_4	C_4^2	σ_v	σ_u	m_x	m_y
C_4^2	C_4^2	C_4^3	E	C_4	m_y	m_x	σ_v	σ_u
C_4	C_4	C_4^2	C_4^3	E	σ_u	σ_v	m_y	m_x
m_x	m_x	σ_v	m_y	σ_u	E	C_4^2	C_4^3	C_4
m_y	m_y	σ_u	m_x	σ_v	C_4^2	E	C_4	C_4^3
σ_u	σ_u	m_x	σ_v	m_y	C_4	C_4^3	E	C_4^2
σ_v	σ_v	m_y	σ_u	m_x	C_4^3	C_4	C_4^2	E

物理学家最感兴趣的是物理系统的变换群。例如转动、反射、置换、平移等等；使物理系统保持不变的变换，称系统的对称变换。在一个分子中，两个相同原子的置换，对分子来说也是对称变换。例如 H_2O 中，两个氢原子位置对换。一个系统的所有对称变换的集合是一个群，称对称群。

当两个群元素 B 与 C 之间存在 $A^{-1}BA=C$ 时，它们称为共轭元素。因 $AA^{-1}BAA^{-1}=ACA^{-1}$，有 $ACA^{-1}=B$，可见 B 与 C 互为共轭。把一个群的全部元素分成一些集合，使得每一个集合中的所有元素都相互共轭，但属于不同集合的两元素互不共轭，这样的集合，称群的共轭类，简称类。在任何群中，单位元 E 本身自成一类；因为对于群中任一元素 A，有 $A^{-1}EA=E$，可见 E 与 E 为共轭类，即 E 自成一类。

群中的元素的个数为无限多时，称为无限群。群中的元素的个数为有限时，称有限群。下面讲有限群 G 的子群 H. 每个群 G, 都有两个平凡子群，即单位元与群 G 本身。若 $H \neq G$, 即 G 比 H 有更多的元素，则子群 H 称为 G 的真子群。

任意群 G, H 为其子群，则有限群 G 的子群 H 的阶，为 G 的阶的因数。这便称为关于子群的一个定理，也有人称为拉格朗日定理。下面给予证明:

i) 如 $H=G$, 则不需讨论，可表示为 $G=(\boxed{H})$。

ii) 如 $H \neq G$, 则 $\exists x \in G$, 且 $x \notin H$, 可表示为 $G=(\boxed{H},\boxed{x})$。若写成

$$G=(\boxed{a_1, a_2, \cdots\cdots a_t}, a_{t+1}, a_{t+2}, \cdots\cdots a_n) ,$$

作 $Hx=\{hx \mid h \in H\}$, 其中 x 为 G 中任一元素，h 实际上代表 $a_1, a_2, \cdots\cdots a_t$ 中的任一个，竖线划“|”代表 h 在 H 中拿出来，$\{hx|h\in H\}$ 代表一个集合的缩写，于是有

$$Hx=(a_1x , a_2x , \cdots\cdots a_tx) .$$

查看一下，“万一” $a_1x \in H$. 已知 $a_1 \in H$, H 为群，所以 $a_1^{-1} \in H$. 可令 $a_1x=a_3$ ，有

$$a_1^{-1}a_1x=a_1^{-1}a_3 ,$$

即
$$ex=a_1^{-1}a_3 , x=a_1^{-1}a_3 .$$

因 $a_3 \in H$, $a_1^{-1} \in H$, 于是 $a_1^{-1}a_3 \in H$, 即 $x \in H$. 这就错误了，它与原设 ($x \notin H$) 矛盾。可见上述“万一”是错误的，即不存在“万一”，不存在 $a_1x \in H$。可见 Hx 与 H 无公共元素，即 $a_1x \notin H$, $a_1x \in Hx$。这时可能 H 与 Hx 已耗尽了 G 的全部元素，则 G 有 $2t$ 个元素，可表示为 $G=(\boxed{H}, \boxed{Hx})$。

假若，H 与 Hx 还耗不尽 G, 则 $\exists y \in G$ ，且 $y \notin H$, $y \notin Hx$, 可表示为 $G=(\boxed{H},\boxed{Hx},\boxed{y})$。这时再作 $Hy=\{hy \mid h \in H\}$, 若详细地写出则有

$$Hy=(a_1y, a_2y, \cdots\cdots a_ty).$$

与上述证法相同，可见Hy与 H 无公共元素；但 Hx 与 Hy 是否有公共元素呢？"万一" Hx 与 Hy 有公共元素，例如 $a_1x=a_2y$, 则

$$a_2^{-1}a_1x=a_2^{-1}a_2y,$$

即 $a_2^{-1}a_1x=ey$, $a_2^{-1}a_1x=y$.

因 $a_2^{-1}a_1x \in Hx$ ，可见 $y \in Hx$；这就错误了，因它与假设($y \notin Hx$)矛盾。可见 Hx 与 Hy 无公共元素。如果 H 与 Hx 与 Hy 已耗尽了 G 的全部元素，则 G 有 $3t$个元素，可表示为 $G=(\boxed{H},\boxed{Hx},\boxed{Hy})$。如果还耗不尽$G$的全部元素，则依上法类推，即 $\exists Z \in G$, 且$Z \notin H$, $Z \notin Hx$, $Z \notin Hy$, 这时再做

$$Hz=\{a_1z, a_2z, \cdots\cdots a_tx\},$$

……，如此一直继续下去，直到 G 的全部元素耗尽为止。所以 G 等于 H, Hx , Hy , Hz , …… 的合并，记为:

$$G= H \cup Hx \cup Hy \cup Hz \cdots\cdots .$$

故关于子群的一个定理是：有限群 G 之子群 H 的阶，必为 G 之阶的因数；换言之，G的阶为 H 的阶的倍数，由此得证。

下面讲陪集．

上面证明子群定理时，已引入了 Hx 、Hy 、Hz 、……，这些记号称为陪集；其中 x、y、z、…… 为 G 中任一元素．H为子群，但 Hx、Hy、Hz、…… 是集合，不是群；它们是陪着 H 而来的，故称为陪集。

把陪集 Hx、Hy、Hz …… 中的 x、y、z 写在子群 H 的右边，这样的陪集，称为右陪集．如若左乘，写成 xH、yH、zH ……，则称为左陪集。例如上面证明子群定理的例子，写成

$\exists x$, $x \in G$, $x \notin H$, 作

$xH=\{xa_1, xa_2, \cdots\cdots xa_t\}$,

可证 xH 与 H 无公共元素，…… 与上述证明方法相同 ……，于是

$$G=H\cup xH\cup yH\cup zH\cdots\cdots$$

这样一来，可见左陪集的个数与右陪集的个数相等。

下面讲置换群．

上面已经讲过，对称操作如成群，则称对称操作群。平面方形 $ABCD$，通过中心O点作轴，顺时针方向旋转 90°，则 $A\rightarrow B$，$B\rightarrow C$，$C\rightarrow D$，$D\rightarrow A$；用数学表示为

$$\begin{pmatrix} A & B & C & D \\ B & C & D & A \end{pmatrix}，记为(\sigma_{90}\cdot)。$$

旋转 180°，为

$$\begin{pmatrix} A & B & C & D \\ C & D & A & B \end{pmatrix}，记为\ (\sigma_{180}\cdot)。$$

旋转 270°，为

$$\begin{pmatrix} A & B & C & D \\ D & A & B & C \end{pmatrix}，记为\ (\sigma_{270}\cdot)。$$

旋转 360°，为

$$\begin{pmatrix} A & B & C & D \\ A & B & C & D \end{pmatrix}，记为\ (\sigma_{360}\cdot)。$$

现在抽象，A、B、C、D 为任意四件东西，看其排列组合．把它们的位置调动，称为置换；上述 $\sigma_{90}\cdot$、$\sigma_{180}\cdot$、$\sigma_{270}\cdot$、$\sigma_{360}\cdot$ 便称为置换。

n 个数的不同排列有 $n!$ 个，写成抽象置换为 $\begin{pmatrix} 1 & 2 & \cdots\cdots n \\ i_1 & i_2 & \cdots\cdots i_n \end{pmatrix}$，

其中 i_1，i_2，…… i_n 都取从 1，2，…… n．举例如下：

$$\begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 & 4 & 5 \\ 3 & 5 & 1 & 2 & 4 \end{pmatrix}=(13)(254)$$

等式左边的形式，称为置换；右边称为循环置换．其中 (13) 意为

$(1\to3, 3\to1)$，称二元循环置换。(254)意为 $(2\to5, 5\to4, 4\to2)$，称三元循环置换。

又如 $$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7\\7&6&5&4&3&2&1\end{pmatrix}=(17)(26)(35)(4)$$
$$=(17)(26)(35),$$

上式中“(4)”可省略。

再如 $$\begin{pmatrix}1&2&3&4&5&6&7\\2&6&5&7&3&1&4\end{pmatrix}=(126)(35)(47).$$

由上面这些例子可以看出：任意二个循环置换中没有公共的元素。

任意一个 M 个文字的置换，都可写为无公共文字的循环置换的积；且这些循环置换前后位置都可调换。下面举例说明，

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}=(1)(24)(3)$$
$$=(24)(1)(3)$$
$$=(24).$$

对于乘法，有

$$\begin{pmatrix}1&2&3&4\\2&1&3&4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1&2&3&4\\4&1&3&2\end{pmatrix}=\begin{pmatrix}1&2&3&4\\1&4&3&2\end{pmatrix}$$

说明一下上式乘法的由来：首先实行左边第一个置换，它的第一个位置变成 2，可表为 $1\to2$，这个 2 便是指左边第二个置换的第二个位置。然后实行左边第二个置换，它的第二个位置变成 1，可表为 $2\to1$，于是得出乘积的结果为 1，这便是等式右边置换第一个位置的元素。同理，左边第一置换的第二位置变成 1，为 $2\to1$，这个 1 便指第二置换的第一位置，它变成 4，为 $1\to4$，于是乘积

结果右边置换第二位置的元素为 4。同理，可得出第三位置的元素为 3，第四位置的元素为 2。

下面证明

$$\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 3 & 1\end{pmatrix}=(124)(3)$$
$$=(124)$$
$$=(12)(14)$$

首先证明

$$(12)(14)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 3 & 1\end{pmatrix},$$

因

$$(12)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 1 & 3 & 4\end{pmatrix},$$

$$(14)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 4 & 2 & 3 & 1\end{pmatrix};$$

有

$$(12)(14)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 1 & 3 & 4\end{pmatrix}\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 4 & 2 & 3 & 1\end{pmatrix}$$
$$=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 3 & 1\end{pmatrix};$$

已知

$$(124)=\begin{pmatrix}1 & 2 & 3 & 4\\ 2 & 4 & 3 & 1\end{pmatrix};$$

所以

$$(124)=(12)(14).$$

奇数个循环可写成偶数个循环之积，如

$$(123)=(12)(13)$$
$$=(23)(23)(12)(13).$$

偶数个循环也可写成奇数个循环之积，如

$$(23)(23)(12)(13)=(123)$$

n个文字 1，2，…… n的一切置换之集合，关于乘法运算成